HAL
open science

Étude des collisions dépolarisant les raies du "deuxième spectre" du Soleil. Développement et exploitation d'une nouvelle méthode théorique.

Moncef Derouich

▶ **To cite this version:**

Moncef Derouich. Étude des collisions dépolarisant les raies du "deuxième spectre" du Soleil. Développement et exploitation d'une nouvelle méthode théorique.. Astrophysique [astro-ph]. Université Paris-Diderot - Paris VII, 2004. Français. NNT : . tel-00331859

HAL Id: tel-00331859

https://theses.hal.science/tel-00331859v1

Submitted on 26 Dec 2008

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.

Laboratoire d'Étude du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique

THÈSE

présentée pour obtenir le titre de:

Docteur de l'Université Paris VII - Denis Diderot

discipline: Astrophysique et Méthodes Associées

par

Moncef Derouich

SUJET:

Étude des collisions dépolarisant les raies du "deuxième spectre" du Soleil. Développement et exploitation d'une nouvelle méthode théorique.

Soutenue le 9 juin 2004 à l'Observatoire de Paris-Meudon
devant le jury composé de:

Pr. Marcello Fulchignoni	Président du jury
Dr. Gillian Peach	Rapporteur
Pr. Marianne Faurobert	Rapporteur
Pr. Egidio Landi Degl'Innocenti	Examinateur
Dr. Sylvie Sahal-Bréchot	Directeur de thèse
Dr. Véronique Bommier	Examinateur
Pr. Zohra Ben Lakhdar	Invitée

Table des matières

1 Introduction générale **1**

2 Généralités **5**
2.1 Introduction 5
2.2 Polarisation de la lumière 5
2.2.1 Paramètres de Stokes 5
2.2.2 Matrice de polarisation 6
2.2.3 Matrice de polarisation - paramètres de Stokes 7
2.2.4 Signification physique des paramètres de Stokes 7
2.3 Polarisation par diffusion 10
2.3.1 Description classique 10
2.3.2 Description quantique 11
2.4 Assombrissement centre bord 11
2.5 L'effet Hanle 13
2.5.1 L'effet Hanle: interprétation classique 13
2.5.2 L'effet Hanle: interprétation quantique 15

3 Équations de l'équilibre statistique et définition des taux de dépolarisation et de transfert de polarisation **17**
3.1 Introduction 17
3.2 Matrice densité atomique 17
3.3 Opérateurs tensoriels irréductibles (OTI) et équations d'équilibre statistique (EES) 18
3.3.1 Opérateurs tensoriels irréductibles (OTI) 18
3.3.2 Équations d'équilibre statistique (EES) 20
3.4 Taux de dépolarisation et de transfert de polarisation 21
3.4.1 Position du problème 21
3.4.2 Taux de dépolarisation 22
3.4.3 Taux de transfert de polarisation 24
3.5 Remarque importante 24

4 Formalisme de la théorie des collisions adapté à notre problème **25**
4.1 Introduction 25
4.2 Approximation des impacts 25
4.3 Approximation d'une trajectoire rectiligne 25
4.4 Structures fine et hyperfine 26
4.4.1 Structure fine 26
4.4.2 Structure hyperfine 27
4.5 Potentiel RSU 28
4.6 Le nombre quantique effectif 29
4.7 La théorie ABO, historique 29

5 Traitement d'une collision, mise en place des calculs **31**
5.1 Position du problème 31
5.2 Étude du Hamiltonien du système 31
5.3 Dynamique de la collision 32

5.3.1 Formulation du problème de collision 33
5.3.2 Choix d'un repère 36
5.3.3 Potentiel effectif 37
5.4 Mise en place du calcul des taux de dépolarisation et de transfert de polarisation 41
5.4.1 Taux de dépolarisation 41
5.4.2 Taux de transfert de polarisation 42
5.5 Conclusion 43

6 Résultats et Discussions (atomes neutres) 45
6.1 Introduction 45
6.2 Résultats pour les états p des atomes neutres 46
6.2.1 Cas général des états $^2P_{1/2}$, $^1P_1$ et $^2P_{3/2}$ 46
6.3 Résultats pour les états d des atomes neutres 53
6.3.1 Équations couplées 53
6.3.2 Sections efficaces et taux de dépolarisation et de transfert de polarisation 54
6.4 Résultats pour les états f des atomes neutres 58
6.4.1 Équations couplées 58
6.4.2 Sections efficaces et taux de dépolarisation et de transfert de polarisation 59
6.5 Comparaisons de nos résultats à ceux de la chimie quantique et de Van der Waals et discussion 63
6.5.1 Cas de MgI $^1P_1$, de CaI $^1P_1$ et de NaI $^2P_{3/2}$ 64
6.5.2 Cas de SrI $^1P_1$ 69
6.6 Tendances générales 71
6.7 Conclusion 72

7 Extension au cas des ions 73
7.1 Introduction 73
7.2 Potentiel d'interaction 74
7.3 Commentaires sur le choix de E_p 75
7.4 Calcul des taux de dépolarisation et des taux de transfert de polarisation 76
7.5 Résultats pour le cas de Ca^+H 76
7.6 Comparaisons avec les résultats de chimie quantique 81
7.7 Discussions 85
7.7.1 Dépendance des taux de dépolarisation aux différentes régions du potentiel 85
7.7.2 Dépendance des taux de dépolarisation aux valeurs de E_p 86
7.8 Exemple d'application: la raie SrII 4078 Å 87
7.9 Conclusion 89

8 Application: mesure du champ magnétique par interprétation des mesures de polarisation linéaire de la raie SrI 4607 Å 91
8.1 Introduction 91
8.2 Pourquoi la raie SrI 4607 Å? 91
8.3 Formation des raies polarisées dans l'atmosphère solaire 92
8.3.1 Création de la polarisation 92
8.3.2 Variation de la polarisation 92
8.3.3 Équations de base en champ magnétique nul 93
8.3.4 Polarisation en champ magnétique nul 97
8.3.5 Effet d'un champ magnétique 98
8.4 Méthode d'analyse et résultats 102
8.4.1 Profondeur optique de la raie et modèle d'atmosphère 102

8.4.2 Les vitesses microturbulente et macroturbulente 103
8.4.3 Ajustements des profils et résultats 103
8.5 Discussions 106
8.5.1 Effet des vitesses micro et macroturbulentes 106
8.5.2 Effet de l'incertitude sur le taux de dépolarisation collisionnlle 108
8.6 Conclusion 110

9 Conclusions et perspectives 111
9.1 Conclusions 111
9.2 Perspectives 112

A Interaction à longue portée 115

B Expressions des probabilités de dépolarisation et de transfert de polarisation 117
B.1 La moyenne angulaire de la probabilité de transition 117
B.2 Probabilités de dépolarisation et de transfert de polarisation 118

C Articles à referee 123

D Bibliographie 171

Table des figures

Figure 2.1 La base $(\vec{e}_X, \vec{e}_Y)$ est déduite de $(\vec{e}_x, \vec{e}_y)$ par une rotation d'angle α. 8

Figure 2.2 La direction de polarisation repérée par α est la direction du polariseur pour laquelle I_{max} est atteint. 9

Figure 2.3 La diffusion d'un faisceau par un atome est un mécanisme polarisant. Le taux de polarisation et l'intensité dépendent de la direction d'observation. . 11

Figure 2.4 Approximation de l'atmosphère plan-parallèle 12

Figure 2.5 Précession du dipôle autour du vecteur champ magnétique $\vec{B}$, qui conduit à la dépolarisation et à la rotation du direction de la polarisation, d'un angle ϕ, du rayonnement émis par le dipôle. 14

Figure 5.1 Le noyau de l'atome perturbé est localisé en A et le noyau de l'atome d'hydrogène (un proton) en P. Leurs électrons de valence sont notés 1 et 2 respectivement. 32

Figure 5.2 La trajectoire du perturbateur (hydrogène) dans les deux référentiels, atomique et en rotation, $Axyz$ et $AXYZ$. R est la distance interatomique, $R = \sqrt{b^2 + v^2t^2}$. 38

Figure 6.1 En haut à gauche et à droite: taux de destruction de l'alignement (k=2) en fonction de la température T et n^* pour les états p ($l = 1$) où $S = 0$ et $S = \frac{1}{2}$. En bas: taux de transfert de la population (k=0) pour les états p ($l = 1$; $J = \frac{1}{2}$ et $J' = \frac{3}{2}$) en fonction de la température T et n^*. Les taux, par unité de densité des atomes d'hydrogène, sont donnés en 10^{-14} rad. m^3 s^{-1}. 49

Figure 6.2 Section efficaces de destruction de l'alignement (k=2) en fonction de la vitesse relative. 51

Figure 6.3 Taux de destruction de l'alignement (k=2), par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de la tempérautre T. 52

Figure 6.4 Taux de destruction de l'alignement (k=2), par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de la température T et n^* pour les états d ($l = 2$). En haut et à gauche: $S = \frac{1}{2}$ et $J = \frac{3}{2}$; en haut et à droite: $S = 0$ et $J = 2$; en bas: $S = \frac{1}{2}$ et $J = \frac{5}{2}$. Les taux de destruction de l'alignement sont donnés en 10^{-14} rad. m^3 s^{-1}. 56

Figure 6.5 Taux de transfert de la population (k=0) pour les états d ($l = 2$; $S = \frac{1}{2}$, $J = \frac{3}{2}$ et $J' = \frac{5}{2}$), par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de la température T et n^*. Ces taux sont donnés en 10^{-14} rad. m^3 s^{-1}. . . 56

Figure 6.6 Taux de transfert de l'alignement (k=2) pour les états d ($l = 2$; $S = \frac{1}{2}$, $J = \frac{3}{2}$ et $J' = \frac{5}{2}$), par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de la température T et n^*. Ces sont donnés en 10^{-15} rad. m^3 s^{-1}. 57

Figure 6.7 Taux de destruction de l'alignement (k=2) pour les états f ($l = 3$), par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de la température T et n^*. En haut et à gauche: $S = \frac{1}{2}$ et $J = \frac{5}{2}$; en haut et à droite: $S = 0$ et $J = 3$; en bas: $S = \frac{1}{2}$ et $J = \frac{7}{2}$. Les taux de destruction de l'alignement sont donnés en 10^{-14} rad. m^3 s^{-1}. 60

Figure 6.8 Taux de transfert de population (k=0) pour les états f ($l = 3$), par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de la tempérautre T et n^*. $S = \frac{1}{2}$, $J = \frac{5}{2}$ et $J' = \frac{7}{2}$. Le taux de transfert de population est donné en 10^{-14} rad. m^3 s^{-1}. 61
Figure 6.9 Taux de transfert de l'alignement (k=2) pour les états f ($l = 3$), par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de la température T et n^*. $S = \frac{1}{2}$, $J = \frac{5}{2}$ et $J' = \frac{7}{2}$. Les taux de transfert de l'alignement sont donnés en 10^{-15} rad. m^3 s^{-1}. 61
Figure 6.10 Variation en fonction de la température des taux de destruction de l'alignement par unité de densité d'hydrogène. La courbe continue représente nos résultats; la courbe en pointillée représente des résultats de chimie quantique (Kerkeni 2002a); la courbe en points-tirets représente les résultats obtenus avec un potentiel de Van der Waals. 65
Figure 6.11 Variation des section efficaces de dépolarisation $\sigma^2(411, v)$, de l'état $^1P_1$ du calcium, en fonction d'une perturbation du potentiel d'interaction. Les sections efficaces sont calculées pour les trois vitesses relatives: 3 km s^{-1}, 10 km s^{-1} et 17 km s^{-1}. 66
Figure 6.12 Comportement des section efficaces de dépolarisation $\sigma^2(411, v)$, de l'état $^1P_1$ du calcium, en fonction d'une variation de b_0 (équation 5.47). Les sections efficaces sont calculées pour les vitesses relatives: $v = 10$ km s^{-1} et $v = 30$ km s^{-1}. 67
Figure 6.13 Potentiels d'interaction $V(R) \times R^6$ du calcium avec l'hydrogène neutre: la courbe continue représente les calculs *ab initio* (Chambaud & Lévy 1989; Kerkeni 2002a); la courbe en points-tirets représente le potentiel RSU. . . 68
Figure 6.14 Variation des taux de destruction de l'alignement de SrI $^1P_1$, par unité de densité d'hydrogène, $D^2(4\ 1\ 3/2,\ T)/n_H$ en fonction de la température. La courbe continue représente nos résultats; la courbe en pointillée représente des résultats de chimie quantique (Kerkeni 2002a); la courbe en points-tirets représente les résultats obtenus par la méthode de Van der Waals (Deridder et al. 1976). 69
Figure 6.15 Potentiels d'interaction $V(R) \times R^6$ du strontium avec l'hydrogène neutre: la courbe continue représente les calculs *ab initio* (Kerkeni 2002a); la courbe en points-tirets représente le potentiel RSU. Ces deux courbes se rejoignent de manière *ad hoc* pour construire un potentiel hybride. 70

Figure 7.1 Une partie du diagramme du Grotrian de l'ion CaII. Les niveaux supérieur et inférieur de la transition correspondant à la raie de résonance. 77
Figure 7.2 Variation du taux de destruction de l'orientation de l'état $^2P_{1/2}$, par unité de densité d'hydrogène, $D^1(4\ 1\ 1/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Le taux de destruction de l'orientation est en rad. m^3 s^{-1}. 79
Figure 7.3 Variation des taux de dépolarisation, par unité de densité d'hydrogène, $D^k(4\ 1\ 3/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Les taux de dépolarisation sont en rad. m^3 s^{-1}. 79
Figure 7.4 Variation des taux de dépolarisation, par unité de densité d'hydrogène, $D^k(3\ 2\ 3/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Les taux de dépolarisation sont en rad. m^3 s^{-1}. 80
Figure 7.5 Variation des taux de dépolarisation, par unité de densité d'hydrogène, $D^k(3\ 2\ 5/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Les taux de dépolarisation sont en rad. m^3 s^{-1}. 81

Figure 7.6 Variation des taux de transfert de polarisation, par unité de densité d'hydrogène, $D^k(4\ 1\ 1/2 \rightarrow 413/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Les taux de transfert de polarisation sont en $\mathrm{rad.\ m^3\ s^{-1}}$. 82
Figure 7.7 Variation des taux de transfert de polarisation, par unité de densité d'hydrogène, $D^k(3\ 2\ 3/2 \rightarrow 3\ 2\ 5/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Les taux de transfert de polarisation sont en $\mathrm{rad.\ m^3\ s^{-1}}$. 82
Figure 7.8 Variation des taux de destruction de l'alignement de l'état $^2P_{3/2}$, par unité de densité d'hydrogène, $D^2(4\ 1\ 3/2,\ T)/n_H$. La courbe continue représente nos résultats; la courbe en pointillée représente des résultats de chimie quantique (Kerkeni et al. 2003); la courbe en points-tirets représente les résultats obtenus avec un potentiel de Van der Waals. 83
Figure 7.9 Variation des taux de destruction de l'alignement de l'état $^2D_{3/2}$, par unité de densité d'hydrogène, $D^2(3\ 2\ 3/2,\ T)/n_H$. La courbe continue représente nos résultats; la courbe en pointillée représente des résultats de chimie quantique (Kerkeni et al. 2003); la courbe en points-tirets représente les résultats obtenus avec un potentiel de Van der Waals. 84
Figure 7.10 Variation des taux de destruction de l'alignement de l'état $^2D_{5/2}$, par unité de densité d'hydrogène, $D^2(3\ 2\ 5/2,\ T)/n_H$. La courbe continue représente nos résultats; la courbe en pointillée représente des résultats de chimie quantique (Kerkeni et al. 2003); la courbe en points-tirets représente les résultats obtenus avec un potentiel de Van der Waals. 84
Figure 7.11 Variation des section efficaces de dépolarisation $\sigma^2(413/2, v)$ en fonction d'une perturbation du potentiel d'interaction centrée en R_0. Les sections efficaces sont calculées pour les trois vitesses relatives: 3 km s^{-1}, 10 km s^{-1}, 17 km s^{-1}. 85
Figure 7.12 La variation du taux de dépolarisation $D^2(4\ 1\ 3/2, 5000K)/n_H$ en fonction de E_p. 86
Figure 7.13 Variation du taux de destruction de l'orientation de l'état 5p $^2P_{1/2}$, par unité de densité d'hydrogène, $D^1(5\ 1\ 1/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Le taux de destruction de l'orientation est en $\mathrm{rad.\ m^3\ s^{-1}}$. 88
Figure 7.14 Variation des taux de dépolarisation, par unité de densité d'hydrogène, $D^k(5\ 1\ 3/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Les taux de dépolarisation sont en $\mathrm{rad.\ m^3\ s^{-1}}$. 88
Figure 7.15 Variation des taux de transfert de polarisation, par unité de densité d'hydrogène, $D^k(n\ 1\ 1/2 \rightarrow n13/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Ces taux sont en $\mathrm{rad.\ m^3\ s^{-1}}$. 89

Figure 8.1 Les niveaux supérieur et inférieur de la transition correspondant à la raie de résonance SrI 4607 Å. 92
Figure 8.2 Symétrie axiale du rayonnement incident dans l'approximation plan-parallèle. L'axe de symétrie (Oz) est normal à l'atmosphère et θ est l'angle héliocentrique entre la direction du rayonnement et (Oz). 97
Figure 8.3 La direction du champ magnétique est spécifiée par χ_B et θ_B. 98
Figure 8.4 Superposition des profils d'intensité théoriques (pointillé) et observés (ligne continue), de la raie SrI 460.73 nm, à 6 distances comptées vers l'intérieur du limbe solaire: d = 4, 10, 20, 40, 80 et 160 arcsec respectivement. Les profils des intensités théoriques correspondent à (v_{micro}, v_{macro}) de la Table 8.1. 105

Figure 8.5 Superposition des profils de Q/I théoriques (pointillé) et observés (continu), de la raie SrI 4607 Å, à 6 distances du limbe solaire: d = 4, 10, 20, 40, 80 et 160 arcsec respectivement. Ces profils sont obtenus, en utilisant (v_{micro}, v_{macro}) de la Table 8.1, en ajustant la polarisation du centre de la raie par rapport à celle observée. 106

Figure 8.6 Variation du taux de polarisation au centre de la raie en fonction de la distance μ par rapport au limbe. Pour différentes valeurs de μ et pour les vitesses de turbulence à ces distances, la meilleur ajustement de la polarisation au centre de la raie correspond à la valeur appropriée du champ magnétique B en Gauss (voir aussi Table 8.1). $\times$: Mesures de polarisation obtenues avec THEMIS les 7, 8, et 9 Decembre 2002 par V. Bommier et G. Molodij; ligne continue: une fonction moyenne qui fitte les taux polarisation mesurés. 107

Liste des tableaux

Table 4.1 Les valeurs des énergies de séparation entre les niveaux F et $F-1$ de structure hyperfine. Ces valeurs sont données dans le cas de Na dans son état fondamental $3s\ ^2S_{1/2}$ (Ackermann 1966) et dans son état excité $3p\ ^2P_{3/2}$ (Gangrsky et al. 1998). Toutes les énergies sont données en MHz. 27

Table 6.1 Variation des sections efficaces de dépolarisation et de transfert de polarisation $\sigma^k(n1J)$ et $\sigma^k(n1J \to n1J')$, pour une une vitesse relative de $10\ \mathrm{km\ s^{-1}}$, en fonction de n^*. Les sections efficaces sont en unités atomiques. 47

Table 6.2 exposants de vitesse $\lambda^k(n1J)$ et $\lambda^k(n1J \to n1J')$ correspondants aux sections efficaces du Table 6.1. 47

Table 6.3 Taux de destruction de l'alignement et de transfert de la population, par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de n^* et pour la température locale T=5000K pour les états p $(l=1)$ où $S=0$ et $S=\frac{1}{2}$. Les taux sont donnés en 10^{-14} rad. $\mathrm{m^3\ s^{-1}}$. 50

Table 6.4 Valeurs de l'énergie d'ionisation E_∞, de l'énergie E_{nl} de l'état $|nl\rangle$ de l'électron de valence et de n^* pour MgI $3p\ ^1P_1$, CaI $4p\ ^1P_1$, NaI $3p\ ^2P_{3/2}$ et SrI $5p\ ^1P_1$. 51

Table 6.5 Variation des sections efficaces de dépolarisation et de transfert de polarisation $\sigma^k(n2J)$ et $\sigma^k(n2J \to n2J')$, pour une une vitesse relative de $10\ \mathrm{km\ s^{-1}}$, en fonction de n^*. Les sections efficaces sont en unités atomiques. 55

Table 6.6 Exposants de vitesse $\lambda^k(n2J)$ et $\lambda^k(n2J \to n2J')$ correspondants aux sections efficaces du Table 6.5. 55

Table 6.7 Taux de dépolarisation et de transfert de la polarisation d'ordres pairs, par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de n^* et pour la température locale T=5000K. Les taux sont donnés en 10^{-14} rad. $\mathrm{m^3\ s^{-1}}$ sauf pour $D^2(n2\frac{3}{2} \to n2\frac{5}{2})$ qui est donné en 10^{-15} rad. $\mathrm{m^3\ s^{-1}}$. 57

Table 6.8 Variation des sections efficaces de dépolarisation et de transfert de polarisation $\sigma^k(n3J)$ et $\sigma^k(n3J \to n3J')$, pour une une vitesse relative de $10\ \mathrm{km\ s^{-1}}$, en fonction de n^*. Les sections efficaces sont en unités atomiques. 62

Table 6.9 exposants de vitesse $\lambda^k(n3J)$ et $\lambda^k(n3J \to n3J')$ correspondant aux sections efficaces de la Table 6.8. 62

Table 6.10 Taux de dépolarisation et de transfert de la polarisation d'ordres pairs, par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de n^* et pour la température locale T=5000K. Les taux sont donnés en 10^{-14} rad. $\mathrm{m^3\ s^{-1}}$ sauf pour $D^2(n3\frac{5}{2} \to n3\frac{7}{2})$ qui est donné en 10^{-15} rad. $\mathrm{m^3\ s^{-1}}$. 63

Table 7.1 Valeurs de $< p_2^2 >$, la moyenne de la distance au carré entre l'électron de valence et le centre de l'ion CaII en fonction de l'état considéré ($3d$ et $4p$). C_6 est la constante de Van der Waals et $E_p = E_a^0 - E_a^i + E_b^0 - E_b^j$ est l'énergie moyenne correspondant aux interactions H ($4s$)-CaII ($3d$; $4p$). 78

Table 7.2 Comparaisons entre les taux de destruction d'alignement $D^2(n\ l\ J,\ T)/n_H$ pour les états: $4p\ ^2P_{3/2}$, $3d\ ^2D_{3/2}$ et $3d\ ^2D_{5/2}$ du CaII à T=5000K et T=6000K. KSF = (Kerkeni et al. 2003); VdW = Van der Waals. $D^2(nlJ)/n_H$ est en 10^{-15} rad. $\mathrm{m^3\ s^{-1}}$. 83

Table 8.1 Valeurs des vitesses microturbulente et macroturbulente en km s^{-1} pour 6 distances au limbe solaire. 104
Table 8.2 $B_{7/12}$, $B_{8/12}$ et $B_{9/12}$ correspondent à des valeurs des champs magnétiques, en Gauss, calculées à partir des observations du 7, 8, et 9 Décembre respectivement. Ces valeurs sont données pour 6 distances au limbe solaire et pour ($v_{\rm micro}$, $v_{\rm macro}$) de la Table 8.1. 104
Table 8.3 $B_{7/12}$, $B_{8/12}$ et $B_{9/12}$ correspondent des valeurs des champs magnétiques, en Gauss, calculés à partir des observations du 7, 8, et 9 Décembre respectivement. Ces valeurs sont données à 6 distances du limbe solaire et pour ($v_{\rm micro} = 1$ km s^{-1}, $v_{\rm macro} = 2.5$ km s^{-1}). Ces valeurs sont très sensibles à celles des vitesses de turbulence (comparer avec les champs magnétiques, que nous recommandons, de la Table 8.2). 108
Table 8.4 Test de l'influence de la variation du taux de dépolarisation sur le champ magnétique. Les rapports $B_{\rm test}/B$ sont donnés en analysant l'observation de 7 Décembre pour $d = 4$ arcsec. 109

Abstract: The spectrum of the linear polarization observed close to the solar limb (second solar spectrum) shows structures rich in new information. The depolarization rates by collisions with neutral hydrogen atoms are needed in order to quantitatively interpret this spectrum. Very few depolarization rates have currently been computed. To evaluate the effect of these collisions, methods capable of giving reasonable results for many levels of atoms or ions and which are computationally efficient are urgently needed. The goal of this thesis is to try to give an answer to this problem.

In this thesis, we have developed a new semi-classical method for calculating the depolarization rates and polarization transfer rates of spectral lines of neutral and ionised atoms by collisions with atomic hydrogen (Derouich et al. 2003a; Derouich et al. 2003b; Derouich et al. 2004a; Derouich et al. 2004b). Ou method extends the one developed and applied with success during 1990's for collisional line broadening by atomic hydrogen by Anstee, Barklem and O'Mara.

A great advantage of the present method is that it is not specific for a given perturbed atom/ion and may be easily applied to any level of any neutral and singly ionised atom. In particular, our method can be applied to heavy atoms/ions.

We have developed a code to compute the collisional depolarization and polarization transfer rates with our new collisional method. We have been inspired by the line-broadening code of Anstee, Barklem and O'Mara. We have calculated depolarization and polarization transfer rates for p-atomic levels (l=1), d-atomic levels (l=2) and f-atomic levels (l=3). Our results are given in the form of tables allowing computation of the depolarization rates for many levels by simple interpolation or extrapolation.

We have extended our method and the numerical code associated with it to spectral lines of singly ionised atoms.

In order to validate our theory, we have compared our results to quantum chemistry calculations when possible. The differences with quantum chemistry results are less than 20 % for our depolarization rates obtained in the case of NaI, MgI, and CaI atoms and CaII ion. Indeed, we have investigated in the interesting case of SrI $5p\ ^1P_1$: an error of 20-30 % is expected with respect to results based on hybrid interaction potentials assumed as a best estimate (section 6.5.1). We have also compared our results to the depolarization rates calculated with the Van der Waals interaction. This potential strongly underestimates the depolarization rates.

As an application of our semi-classical method, we have interpreted the spectropolarimetric observations of the resonance SrI 4607 Å line, obtained with the THEMIS telescope in December 2002 by V. Bommier & G. Molodij, in terms of a turbulent magnetic field. The depolarization rates calculated using our method have entered the statistical equilibrium equations coupled with the polarized radiation transfer equations. The adopted formalism was developed by Landi Degl'Innocenti, Bommier, & Sahal-Bréchot (1990). The determination of the magnetic field strongly depends on the microturbulent and macroturbulent velocities. We have obtained These velocities by comparing the theoretical profiles to the observed ones. The discrepancy between

the polarization calculated in the absence of a magnetic field and the polarization observed in the SrI 4607 Å line is consistent with the presence of an average magnetic field strength of 46 Gauss in the region between 200 and 300 km above the optical depth at 5000 Å $\tau_{5000} = 1$ level.

Finally, we have shown that an error less than 20 % on the depolarization rates corresponding to an error less than 10 % on the value of the derived turbulent magnetic field. This error is well located within the expected error bar on the value of the magnetic field. This completely validate our semi-classical method for collisional depolarization of spectral lines by atomic hydrogen in view to the contribution to the interpretation of the second solar spectrum.

Résumé: Le spectre de polarisation linéaire observé au bord solaire (second spectre solaire) révèle une structure riche d'informations. L'interprétation quantitative de ce spectre de polarisation nécessite de prendre en compte les taux de dépolarisation par les collisions isotropes avec les atomes neutres d'hydrogène. Ces taux sont très mal connus à l'heure actuelle. Le développement d'une méthode collisionnelle, applicable au grand nombre d'atomes présents dans le second spectre solaire, et qui soit suffisamment précise et efficace, est indispensable pour combler ce vide. L'objectif de cette thèse est de répondre à ce besoin urgent.

Dans cette thèse nous avons développé une nouvelle méthode semi-classique pour calculer les taux de dépolarisation et les taux de transfert de polarisation des raies spectrales des atomes et des ions par collisions avec les atomes neutres d'hydrogène (Derouich et al. 2003a; Derouich et al. 2003b; Derouich et al. 2004a; Derouich et al. 2004b). Notre méthode est une extension de celle développée et appliquée avec succès aux élargissement des raies par collisions avec les atomes neutres d'hydrogène, dans les années 90, par Anstee, Barklem et O'Mara.

Un grand avantage de notre méthode est qu'elle n'est pas spécifique à un atome/ion perturbé donné; elle peut être facilement appliquée à n'importe quel état de n'importe quel atome.

Nous avons développé un code numérique pour calculer les taux de dépolarisation par notre nouvelle méthode, code inspiré de celui qui calcule l'élargissement des raies de Anstee, Barklem et O'Mara. Nous avons calculé les taux de dépolarisation pour les états p ($l = 1$), d ($l = 2$) et f (l=3) des atomes neutres. Nous avons fourni des tableaux de données simples d'utilisation et permettant de déterminer les taux de dépolarisation pour de nombreux niveaux par interpolation ou par extrapolation.

Nous avons étendu notre méthode et le code numérique qui lui est associé aux atomes une fois ionisés.

Dans le but de valider notre théorie, nos résultats ont été comparés à des résultats de chimie quantique quand cela est possible. Les différences entre nos taux de dépolarisation et ceux

obtenus par une approche de chimie quantique, dans les cas des atomes Na I, Mg I, et Ca I et l'ion Ca II, sont toujours inférieurs à 20 %. De plus, nous nous sommes intéressé au cas important du SrI $5p\ ^1P_1$: une erreur de 20-30 % est attendue par rapport à des résultats basés sur un potentiel d'interaction hybride considéré comme étant le plus précis (section 6.5.1). Nos résultats ont été aussi comparé à ceux que nous avons obtenus en utilisant un potentiel de Van der Waals. Les taux de dépolarisation obtenus en utilisant ce potentiel sont largement sous-estimés.

Nous avons ensuite interprété les observations des taux de polarisation linéaire de la raie SrI 4607 Å, obtenues avec THEMIS en Décembre 2002 par V. Bommier et G. Molodij, en terme de champ magnétique turbulent. Nous avons introduit nos taux de dépolarisation dans le code de transfert de rayonnement en présence de champ magnétique associé au formalisme développé par Landi Degl'Innocenti, Bommier et Sahal-Bréchot (1990). La détermination du champ magnétique dépend de façon très sensible de celle des vitesses microturbulente et macroturbulente. Nous avons déterminé Ces vitesses par superposition des profils des intensités théoriques, obtenus dans l'hypothèse d'une atmosphère non-magnétisée, à ceux observés. La différence entre la polarisation calculée pour une atmosphère non-magnétisée et la polarisation observée de la raie SrI 4607 Å est cohérente avec la présence d'un champ magnétique moyen de 46 Gauss dans les région entre 200 et 300 km au-dessus du niveau correspondant à la profondeur optique $\tau_{5000} = 1$.

Enfin, nous avons montré qu'une erreur inférieure à 20 % sur les taux de dépolarisation correspond à une erreur inférieure à 10 % sur le champ magnétique turbulent qui en dérive. Cette erreur entre bien dans la barre d'erreur attendue sur la valeur du champ magnétique validant complètement notre méthode semi-classique de calcul des taux de dépolarisation pour contribuer à l'interprétation du second spectre du soleil.

Chapitre 1

Introduction générale

À la surface du soleil, lorsque le rayonnement illuminant un système atomique (atome, ion ou molécule) est anisotrope à cause de l'assombrissement centre bord (i.e. la radiation qui excite l'émetteur en venant du centre est plus grande que celle venant du bord), la lumière diffusée par ce système atomique, peut être polarisée linéairement. On observe alors un spectre de polarisation linéaire créée par diffusion résonante d'un rayonnement anisotrope. Ce spectre est communément nommé le "second spectre solaire"[1].

Le "second spectre solaire" est le spectre de la polarisation linéaire, des raies d'absorption, observées dans les régions calmes près du bord solaire. La structure de ce spectre est très différente de celle du spectre en intensité, d'où son nom. Cette structure, très riche, est porteuse d'informations nouvelles.

Les premières observations "fiables" de ce spectre furent obtenus au Grégory Coudé Télescope (Observatoire de Göttingen, station solaire de Locarno, Suisse) par Brückner (1963) (observation de la raie de résonance 4227 Å du CaI). Les observations de la polarisation linéaire se succèdent en observant des raies d'absorption dans les régions calmes du soleil (Stenflo 1974; Wiehr 1975, 1978)[2] et montrent en particulier l'importance des taux de polarisation de raies comme, CaI 4227 Å, NaI D_2, BaI 5535 Å, SrI 4607Å, ...

Des observations effectuées par Stenflo et al. 1980, avec le High Altitude Observatory Stokesmeter à Sacramento Peak (NM, USA), constituent une confirmation de l'importante des signaux de polarisation linéaire de ces raies (en particulier, il trouva un taux de polarisation linéaire du Sr 4607Å d'environs 10 % à 4 arcsec du limbe du pôle nord du soleil).

Il faudra attendre le milieu des années 90 et la mise en service du polarimètre ZIMPOL (Zurich IMaging POLarimeter Povel 1995) pour progresser dans ce domaine. De nouvelles observations atteignant un niveau de précision de 10^{-5} sur le degré de polarisation révèlent alors toute la "richesse des structures" vues en polarisation linéaire (Stenflo & Keller 1996; Gandorfer 2000, 2001; Bommier & Molodij 2002...), quand bien même il est parfois quasiment impossible de discerner quelques profils en intensité dans le domaine spectral observé (MgH, C_2, ...).

Les observations du second spectre solaire se poursuivent, depuis l'été 2000, avec succès avec le télescope THEMIS (Heliographic Telescope for the Study of the Magnetism and Instabilities on the Sun), et l'interprétation de ces données n'en est qu'à ses débuts.

L'interprétation de ces mesures de polarisation peut apporter des informations sur les anisotropies des processus de formation de la raie, sur les champs magnétiques, également sur les champs de vitesses, et aussi sur les densités de perturbateurs (particules entrant en collision avec la particule qui rayonne la lumière polarisée).

Pour un diagnostic quantitatif du magnétisme solaire par interprétation du second spectre solaire, il est souvent indispensable d'introduire la dépolarisation collisionnelle dans les processus de formation des raies en lumière polarisée. Dans l'atmosphère et les régions basses du

[1] C'est V.V. Ivanov (1991,1995) qui a proposé de baptiser "second spectre solaire" cette nouvelle fenêtre.

[2] En parallèle des observations, dans les régions actives du soleil, des raies de protubérances montrent des taux de polarisation linéaire importants (Leroy et al. 1977; Querfeld 1977; Arnaud 1977; ...).

soleil, où se forme ce “second spectre solaire”, la dépolarisation est due aux collisions isotropes avec les atomes neutres d'hydrogène. La communauté des astrophysiciens demande de plus en plus un grand nombre de taux collisionnels pour l'analyse de leurs observations.

Un calcul précis des sections efficaces de dépolarisation, de transfert de polarisation et de transfert de population entre niveaux et sous niveaux Zeeman est très lourd, car il demande de faire intervenir la chimie quantique et la théorie des collisions en couplage fort. Ce calcul est spécifique pour chaque niveau de chaque atome: ceci ne répond pas assez à la demande. En outre, il n'existe pas de mesures en laboratoire aux températures existant dans la zone du soleil où se forment les raies du deuxième spectre solaire. Une méthode générale, applicable à un grand nombre d'atomes, mais qui ne peut être qu'approchée, est donc la bienvenue, si elle est suffisamment précise, pour pouvoir déterminer rapidement le maximum de données sur les collisions dépolarisantes.

Dans certains cas, des raies d'atomes lourds présentent des taux de polarisation linéaire importants, et pour les interpréter on a besoin des taux de dépolarisation et des taux de transfert de polarisation. Le problème du calcul de ces taux pour ces atomes lourds, est pratiquement inabordable par une approche de chimie quantique d'où la nécessité, une fois de plus, du développement d'une méthode approchée.

Notre objectif est le développement d'une méthode approchée, permettant un calcul assez précis de nombreuses sections efficaces de dépolarisation, de transfert de polarisation linéaire et de transfert de population par collisions avec les atomes neutres d'hydrogène. Notre méthode, nouvelle pour les problèmes de dépolarisation collisionnelle, est inspirée de la théorie développée dans les années 90 par l'équipe d'O'Mara pour les calculs d'élargissement des raies dû aux collisions avec les atomes neutres d'hydrogène. L'interaction entre les deux particules est suffisamment faible pour que l'atome perturbateur ne soit pas dévié: le perturbateur (hydrogène neutre) est supposé en mouvement rectiligne uniforme classique.

Cette méthode semi-classique est suffisamment précise aux régions intermédiaires des distances atome-hydrogène perturbateur qui jouent le rôle essentiel dans le calcul des sections efficaces.

Cette méthode, simple à mettre en œuvre, donne des résultats bien meilleurs (différences de moins de 20 % avec les résultats élaborés donnés par la chimie quantique) que ceux donnés par la méthode de Van der Waals (cette méthode sous-estime les résultats d'un facteur 2 et plus). Nous avons montré que, lors d'une collision isotrope avec les atomes neutres d'hydrogène, les effets des interactions a courte portée et des interactions à longue portée sur la polarisation atomique sont minimes. Les sections efficaces de dépolarisation, de transfert de polarisation linéaire et de transfert de population ne sont sensibles pratiquement qu'aux régions intermédiaires des potentiels d'interaction, qui sont bien décrites par notre méthode.

Cette méthode semi-classique permet de traiter rapidement la majorité des cas qu'on peut rencontrer en astrophysique et notamment le cas des atomes lourds. Les méthodes de chimie quantique sont généralement incapables de traiter le cas de ces atomes.

Nous avons adapté le formalisme, d'élargissement des raies, de l'équipe d'O'Mara à celui de la dépolarisation par collisions. En suite, nous avons développé un code numérique, en nous nous basant sur celui de Anstee, Barklem et O'Mara, pour calculer les différents taux de dépolarisation, de transfert de population et de transfert de polarisation linéaire. Les grandes lignes de ce code consistent à:

– calculer des fonctions d'ondes Coulombiennes et des potentiels d'interaction suivant la méthode d'Anstee-Barklem-O'Mara (méthode ABO).

– introduire ces potentiels dans des équations couplées semi-classiques (obtenues à partir de l'équation de Schrödinger dépendante du temps) pour calculer les probabilités de dépolari-

sation, de transfert de population et de transfert de polarisation dans la base des opérateurs tensoriels irréductibles (OTI).

– intégrer ces probabilités sur tous les paramètres d'impact afin d'obtenir les sections efficaces.

– intégrer enfin les sections efficaces sur une distribution Maxwellienne de vitesses et on obtient ainsi les taux de dépolarisation, de transfert de population et de transfert de polarisation.

Dans le deuxième chapitre de cette thèse on introduit quelques notions générales qui seront utilisées par la suite. Après nous allons définir les taux de dépolarisation et les taux de transfert de polarisation (chapitre 3). Ensuite nous présenterons notre méthode semi-classique et nous formulons ainsi le problème de calcul de ces taux (chapitres 4 et 5). Nous donnerons nos résultats du calcul dans le cas des états p, d et f pour les atomes neutres (chapitre 6). Les comparaisons de nos résultats avec ceux de la chimie quantique (Kerkeni 2002a), quand ils existent, sont très encourageantes (le plus souvent moins de 20 % d'écart). En comparant aussi nos résultats avec ceux obtenus en utilisant le potentiel de Van der Waals, nous concluons que notre méthode constitue une amélioration importance de l'ancienne méthode de Van der Waals.

L'étape suivante dans le développement cette méthode est son extension, dans le cas des états p, d et f, aux atomes une fois ionisés (chapitre 7). Les modifications nécessaires par rapport au cas des atomes neutres sont présentées.

Nous avons appliqué notre méthode aux deux cas particuliers du triplet infrarouge du CaII et à la raie du 4078 Å de SrII. Ces raies présentent des pics importants de polarisation linéaire (Bianda et al. 1998; Stenflo et al. 1980; Stenflo et al. 1983a; Stenflo et al. 1983b; Dittmann et al. 2001; Manso Sainz & Trujillo Bueno 2001; Trujillo Bueno & Manso Sainz 2001). Les taux de dépolarisation obtenus par notre méthode dans le cas du CaII diffèrent de moins de 15 % des taux récemment calculés par une approche de chimie quantique (Kerkeni et al. 2003).

En vue d'une détermination concrète du champ magnétique turbulent dans les régions calmes du bord solaire, nous avons effectué une première application, avec l'interprétation de la polarisation de la raie SrI 4607 Å (chapitre 8). Il s'agit d'un cas relativement simple, où l'approximation d'un atome à deux niveaux est suffisante pour décrire le modèle atomique. Le formalisme adopté est celui présenté par Landi Degl'Innocenti et al. (1990); les solutions numériques des équations couplées, de l'équilibre statistique (EES) et du transfert de rayonnement polarisé en présence d'un champ magnétique, sont résolues suivant le code présenté par Bommier et al. (1991).

En comparant nos résultats de calcul à des observations polarimétriques (observations de G. Molodij et V. Bommier 7, 8 et 9 Décembre 2002 avec THEMIS), nous avons mis en évidence une dépolarisation magnétique due à un champ magnétique. On n'observe pas de rotation de la direction de polarisation par rapport à la direction du bord solaire, le champ magnétique dépolarisant n'a pas de direction privilégiée, il s'agit de "l'effet Hanle[3]" sans rotation de direction de polarisation.

L'investigation du champ magnétique turbulent aux regions calmes du soleil via son effet Hanle fournit une valeur moyenne de 46 Gauss.

[3]Voir chapitre 2

Chapitre 2

Généralités

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, on introduit quelques points particuliers en raison de leur intérêt pour une meilleure compréhension des objectifs et des résultats de cette thèse. Le début de ce chapitre sera consacré à une description de la polarisation des raies via les paramètres de Stokes et la matrice de polarisation. On étudiera ensuite le phénomène de l'assombrissement centre-bord responsable de la polarisation des raies du deuxième spectre solaire. L'effet Hanle sera aussi présenté.

2.2 Polarisation de la lumière

Une onde est non polarisée si son vecteur champ électrique $\vec{E}$ a une direction de vibration qui varie aléatoirement: c'est le cas de la lumière naturelle. Un rayonnement est dit polarisé si $\vec{E}$ présente une direction de vibration privilégiée. En particulier,

– le rayonnement est polarisé linéairement si $\vec{E}$ a une direction de vibration bien définie dans l'espace: l'extrémité du vecteur $\vec{E}$ décrit un segment de droite.

– le rayonnement est polarisé circulairement si l'extrémité du vecteur $\vec{E}$ décrit un cercle au cours d'une période de vibration.

Vers 1850, Sir George Gabriel Stokes montra qu'on peut déterminer complètement l'état de polarisation de la lumière, à partir d'un nombre limité de quantités physiques. Un détecteur placé sur le trajet d'un faisceau de lumière polarisée (partiellement ou totalement) et précédé éventuellement d'un analyseur, pendant un intervalle du temps grand devant la période de l'onde, mesure ces quantités.

2.2.1 Paramètres de Stokes

On peut caractériser généralement la polarisation de la lumière par les quatre paramètres de Stokes I, Q, U et V.

Nous considérons une base de vecteurs orthonormés $(\vec{e}_x,\ \vec{e}_y,\ \vec{e}_z)$ et un faiseau monochromatique de fréquence ν se propageant parallèlement à $\vec{e}_z$ dans le vide. Le vecteur champ électrique $\vec{E}$ est perpendiculaire à $\vec{e}_z$ et contenu dans le plan de polarisation $(\vec{e}_x,\ \vec{e}_y)$. Nous développons $\vec{E}$ sur la base $(\vec{e}_x,\ \vec{e}_y)$:

$$\vec{E} = E_x\vec{e}_x + E_y\vec{e}_y, \tag{2.1}$$

E_x et E_y sont les compsantes instantanées réelles du vecteur $\vec{E}$. Les paramètres de Stokes sont définis par:

$$\begin{aligned} I &= < E_x^2(t) > + < E_y^2(t) > \\ Q &= < E_x^2(t) > - < E_y^2(t) > \\ U &= 2 < E_x(t)E_y(t) > \end{aligned} \tag{2.2}$$

$$V = 2 < E_x(t)E_y(t+\frac{1}{4\nu}) >$$

$< >$ symbolise une moyenne sur un intervalle de temps très grand devant une période de vibration.

On peut mettre aussi $\vec{E}$ sous la forme:

$$\vec{E} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\vec{\mathcal{E}}(t)\ \exp(-\mathrm{i}2\pi\nu t) + \vec{\mathcal{E}}^*(t)\ \exp(\mathrm{i}2\pi\nu t)] \tag{2.3}$$

où

$$\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}_x\vec{e}_x + \mathcal{E}_y\vec{e}_y, \tag{2.4}$$

le rapport des composantes $\frac{\mathcal{E}_x(t)}{\mathcal{E}_y(t)}$ est constant pour un rayonnement complètement polarisé et variable lentement au cours du temps (par rapport à la période de vibration) pour un rayonnement pas ou partiellement polarisé. Les paramètres de Stokes sont donnés, en fonction des composantes du vecteur complexes $\vec{\mathcal{E}}_i(t)$, par:

$$\begin{aligned} I &= < \mathcal{E}_x(t)\mathcal{E}^*{}_x(t) > + < \mathcal{E}_y(t)\mathcal{E}^*{}_y(t) > \\ Q &= < \mathcal{E}_x(t)\mathcal{E}^*{}_x(t) > - < \mathcal{E}_y(t)\mathcal{E}^*{}_y(t) > \\ U &= < \mathcal{E}_x(t)\mathcal{E}^*{}_y(t) > + < \mathcal{E}_y(t)\mathcal{E}^*{}_x(t) > \\ V &= \mathrm{i}(< \mathcal{E}_x(t)\mathcal{E}^*{}_y(t) > - < \mathcal{E}_y(t)\mathcal{E}^*{}_x(t) >) \end{aligned} \tag{2.5}$$

2.2.2 Matrice de polarisation

La matrice de polarisation est une autre représentation possible de l'état de polarisation du faisceau de rayonnement polarisé.

Dans la base $(\vec{e}_x,\ \vec{e}_y,\ \vec{e}_z)$, la matrice de polarisation du faisceau peut s'écrire sous la forme (Landau & Lifshitz 1967; Born & Wolf 1959):

$$\Pi = \begin{pmatrix} < \mathcal{E}_x(t)\mathcal{E}^*{}_x(t) > & < \mathcal{E}_x(t)\mathcal{E}^*{}_y(t) > \\ < \mathcal{E}_y(t)\mathcal{E}^*{}_x(t) > & < \mathcal{E}_y(t)\mathcal{E}^*{}_y(t) > \end{pmatrix} \tag{2.6}$$

Cette matrice de polarisation peut s'écrire aussi sous la forme vectorielle suivante:

$$\Pi = < |\vec{\mathcal{E}} >< \vec{\mathcal{E}}| > \tag{2.7}$$

La matrice de polarisation Π est hermitique (Π=$\Pi^\dagger$) et sa trace est égal à l'intensité I du faisceau. Comme on l'a déjà mentionné, les signaux mesurés sont des valeurs moyennées sur un grand intervalle de temps. Si on suppose que cet intervalle est égal à $|t_2 - t_1|$, le déterminant de Π, noté detΠ, est:

$$\begin{aligned} \det\Pi &= \frac{1}{|t_2-t_1|^2}\int_{t_1}^{t_2}\mathcal{E}_x(t)\mathcal{E}^*{}_x(t)dt \times \int_{t_1}^{t_2}\mathcal{E}_y(t)\mathcal{E}^*{}_y(t)dt \\ &- \frac{1}{|t_2-t_1|^2}\int_{t_1}^{t_2}\mathcal{E}_x(t)\mathcal{E}^*{}_y(t)dt \times \int_{t_1}^{t_2}\mathcal{E}^*{}_x(t)\mathcal{E}_y(t)dt \end{aligned} \tag{2.8}$$

d'après l'inégalité de Schwartz:

$$\int_{t_1}^{t_2} f(t)f^*(t)dt \times \int_{t_1}^{t_2} g(t)g^*(t)dt \geq |\int_{t_1}^{t_2} f(t)g^*(t)dt|^2, \tag{2.9}$$

où $f(t)$ et $g(t)$ sont des fonctions de temps qui représentent ici les deux composantes du champ électrique, $\det\Pi \geq 0$. L'égalité correspond au cas $\frac{\mathcal{E}_y(t)}{\mathcal{E}_x(t)}$ = constante (équation 2.8), $\det\Pi = 0$ est donc caractéristique des faisceaux totalement polarisés. Pour $\det\Pi > 0$, la matrice de polarisation Π admet deux valeurs propres λ_1 et λ_2. Soient $|e_1>$ et $|e_2>$ les vecteurs propres correspondants, on a alors:

$$\Pi = \lambda_1 |e_1><e_1| + \lambda_2 |e_2><e_2| \tag{2.10}$$

D'une façon générale, on peut toujours considérer n'importe quel faisceau de rayonnement, se propageant dans une direction donnée, comme la superposition incohérente de deux faisceaux polarisés parallèlement aux directions $|e_1>$ et $|e_2>$ (qui sont perpendiculaires entre elles) et d'intensités respectives λ_1 et λ_2. $|e_1>$ et $|e_2>$ sont appelées directions principales de vibration du faisceau de rayonnement.

2.2.3 Matrice de polarisation - paramètres de Stokes

Les deux représentations, matrice de polarisation et paramètres de Stokes, de l'état de polarisation d'un faisceau sont liées. D'après les équations (2.5) et (2.6), les quatre paramètres de Stokes s'expriment en fonction des éléments de la matrice polarisatrion Π_{ij} $(i, j = x, y)$ par:

$$\begin{aligned} I &= \Pi_{xx} + \Pi_{yy} \\ Q &= \Pi_{xx} - \Pi_{yy} \\ U &= \Pi_{xy} + \Pi_{yx} \\ V &= \mathrm{i}(\Pi_{xy} - \Pi_{yx}). \end{aligned} \tag{2.11}$$

La matrice de polarisation peut alors s'écrire en fonction des paramètres de Stokes et on a:

$$\Pi = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} I+Q & U-\mathrm{i}V \\ U+\mathrm{i}V & I-Q \end{pmatrix} \tag{2.12}$$

2.2.4 Signification physique des paramètres de Stokes

Cas particulier d'un faisceau totalement polarisé

L'inégalité $\det\Pi \geq 0$ peut s'écrire sous la forme:

$$I^2 - Q^2 - U^2 - V^2 \geq 0, \tag{2.13}$$

le taux de polarisation du faisceau au sens des paramètres de Stokes est défini par

$$p = \frac{\sqrt{Q^2 + U^2 + V^2}}{I}. \tag{2.14}$$

Dans le cas simple d'un faisceau totalement polarisé ($p = 1$), l'état de polarisation est caractérisé par trois paramètres physiques indépendants puisque dans ce cas $\det\Pi = 0$ et donc $I = Q^2 + U^2 + V^2$. Le rapport $\frac{\mathcal{E}_y(t)}{\mathcal{E}_x(t)}$ est constant, on peut écrire

$$\frac{\mathcal{E}_y(t)}{|\mathcal{E}_y(t)|} = \frac{\mathcal{E}_x(t)}{|\mathcal{E}_x(t)|}\exp(\mathrm{i}\delta) \tag{2.15}$$

δ étant la différence de phase; les paramètres de Stokes sont alors donnés par:

$$\begin{aligned} I &= I_x + I_y \\ Q &= I_x - I_y \\ U &= 2I_xI_y cos\delta \\ V &= 2I_xI_y sin\delta, \end{aligned} \tag{2.16}$$

avec $I_x =< |\mathcal{E}_x(t)|^2 >$ et $I_y =< |\mathcal{E}_y(t)|^2 >$. Un faisceau polarisé linéairement est défini par $\delta = 0$ ce qui entraîne $V = 0$. De même un faisceau polarisé circulairement est caractérisé par $\delta = \pm\frac{\pi}{2}$ et $I_x = I_y$; Q et U sont alors nuls. Q et U caractérisent la polarisation linéaire et V la polarisation circulaire.

Transformation des paramètres de Stokes dans une rotation et signification physique

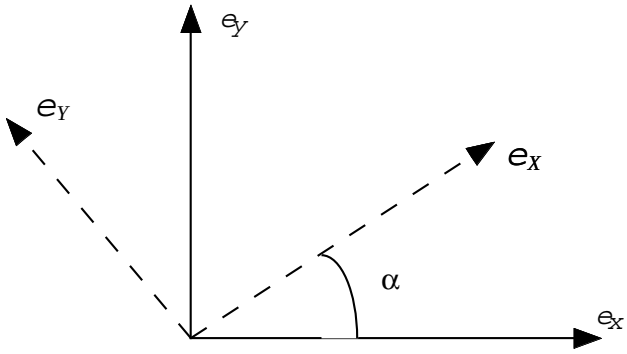

Figure 2.1: La base $(\vec{e}_X, \vec{e}_Y)$ est déduite de $(\vec{e}_x, \vec{e}_y)$ par une rotation d'angle α.

Soit $(\vec{e}_X, \vec{e}_Y)$ la base obtenue par une rotation d'angle α de la base $(\vec{e}_x, \vec{e}_y)$ (Figure 2.1). Les nouveaux paramètres de Stokes, associés aux composantes du champ électrique $\mathcal{E}_X(t)$ et $\mathcal{E}_Y(t)$ dans la nouvelle base, sont exprimés en fonction des paramètres de Stokes, associés aux composantes $\mathcal{E}_x(t)$ et $\mathcal{E}_y(t)$ dans l'ancienne base, par

$$\begin{aligned} I(\alpha) &= I \\ Q(\alpha) &= Qcos2\alpha + Usin2\alpha \\ U(\alpha) &= -Qsin2\alpha + Ucos2\alpha \\ V(\alpha) &= V \end{aligned} \tag{2.17}$$

Il apparaît que I, V et $Q^2 + U^2$ sont des quantités intrinsèques ne dépendent pas du choix des axes: ces quantités sont conservées quelque soit l'angle α. $Q(\pi/4) = U(0)$: $Q(0)$ étant la différence des intensités mesurées successivement parallèlement à $\vec{e}_x$ et $\vec{e}_y$, $U(0)$ peut être mesuré en mesurant la différence des intensités le long des 1ère et 2ème bissectrice de la base $(\vec{e}_x, \vec{e}_y)$.

Cas d'une polarisation quelconque: Taux de polarisation linéaire, direction de polarisation linéaire et polarisation circulaire

Le taux de polarisation linéaire est défini par

$$P_L = \frac{I_{max} - I_{min}}{I_{max} + I_{min}}, \tag{2.18}$$

où I_{max} et I_{min} sont les intensités maximales et minimales mesurées après avoir placé un polariseur sur le faisceau et l'avoir fait tourner; la direction de polarisation, direction privilégiée du champ électrique, est celle de l'axe principal du polariseur où I_{max} est atteint. Dans le plan $(x\mathrm{O}y)$, cette direction est repérée par l'angle α (modulo π)(Figure 2.2).

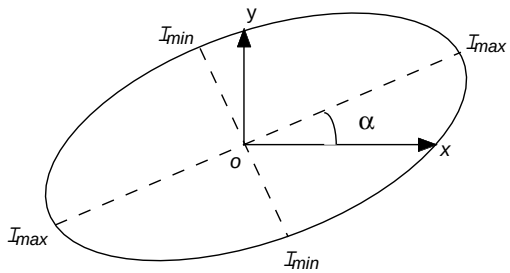

Figure 2.2: La direction de polarisation repérée par α est la direction du polariseur pour laquelle I_{max} est atteint.

Exprimons P_L et α en fonction des paramètres de Stokes définis dans le plan $(x\mathrm{O}y)$. Lorsque l'axe du polariseur fait un angle α' avec $(\mathrm{O}x)$, l'intensité mesurée vaut (équation 2.17)

$$I(\alpha') = \frac{1}{2}(Q\ cos2\alpha' + U\ sin2\alpha' + I) \tag{2.19}$$

En posant $cos2\alpha = \frac{Q}{\sqrt{Q^2+U^2}}$ et $sin2\alpha = \frac{U}{\sqrt{Q^2+U^2}}$, on obtient:

$$I(\alpha') = \frac{1}{2}(\sqrt{Q^2+U^2}\ cos2(\alpha'-\alpha) + I) \tag{2.20}$$

On fait tourner le polariseur, on obtiendra l'intensité maximale

$$I_{max} = \frac{1}{2}(\sqrt{Q^2+U^2} + I), \tag{2.21}$$

pour $\alpha' = \alpha + k\pi$ (k entier), et la valeur de l'intensité minimale

$$I_{min} = \frac{1}{2}(-\sqrt{Q^2+U^2} + I), \tag{2.22}$$

pour $\alpha' = \alpha + \frac{1}{2}\pi + k\pi$.
Le taux de polarisation linéaire est, d'après l'équation (2.18),

$$P_L = \frac{\sqrt{Q^2+U^2}}{I} \tag{2.23}$$

et la direction de polarisation est repérée par α.

Pour exprimer la polarisation circulaire, on se place dans la base $(\vec{e}_+, \vec{e}_-)$ définie par:

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \vec{e}_+ & = & -\frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_x + \mathrm{i}\vec{e}_y) \\ \vec{e}_- & = & \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_x - \mathrm{i}\vec{e}_y), \end{array} \right. \tag{2.24}$$

dans cette base, la matrice de polarisation est:

$$\Pi = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} I+V & -Q+\mathrm{i}U \\ -Q-\mathrm{i}U & I-V \end{pmatrix} \tag{2.25}$$

$\vec{e}_+$ et $\vec{e}_-$ sont associés aux polarisations circulaire gauche et droite respectivement, on note $I_{\circlearrowleft} =< |\mathcal{E}_+(t)|^2 >$ et $I_{\circlearrowright} =< |\mathcal{E}_-(t)|^2 >$.
Le taux de polarisation circulaire est défini par

$$P_C = \frac{I_{\circlearrowright} - I_{\circlearrowleft}}{I_{\circlearrowright} + I_{\circlearrowleft}}, \tag{2.26}$$

et donc

$$P_C = \frac{-V}{I}, \tag{2.27}$$

on retrouve ainsi le taux de polarisation au sens des paramètres de Stokes où

$$p = \sqrt{P_L^2 + P_C^2} \tag{2.28}$$

2.3 Polarisation par diffusion

2.3.1 Description classique

Nous allons étudier le cas d'un atome (ou un ion) soumis à une radiation électromagnétique monochromatique dont la longueur d'onde est dans le domaine visible.

En l'absence de radiation, le nuage électronique est centré sur le noyau atomique. Mais en présense de radiation, le nuage électronique est déformé et son barycentre ne coïncide plus avec le noyau. D'un point de vue classique, on dit qu'il y a apparition d'un dipôle[1] électrique qui oscille proportionnellement à la distance entre le noyau et le barycentre des charges négatives.

Dans le cas où le rayonnement est isotrope, l'atome se comporte à son tour comme une source émissive qui envoie de la lumière de manière équivalente dans toutes les directions. Par conséquent, la lumière réémise est non polarisée. Dans le cas d'un faisceau incident, non polarisé et d'intensité I_0, se propageant dans une direction faisant un angle α avec la direction d'observation (Figure 2.3), deux dipôles sont excités parallèlement aux deux directions $\vec{e}_x$ et $\vec{e}_y$. La composante du champ électrique suivant $\vec{e}_y$, perpendiculaire au plan de diffusion, est vue sans changement selon $\vec{e'}_y = \vec{e}_y$. Au contraire, l'observateur ne verra, selon $\vec{e'}_x$, de la composante suivant $\vec{e}_x$ que sa projection sur le plan perpendiculaire à l'axe de propagation du rayonnement diffusé: l'amplitude diffusée est réduite d'un facteur $cos\alpha$. Le faisceau diffusé, observé à un angle α par rapport à sa direction de propagation (Figure 2.3), est polarisé linéairement, son taux de polarisation est

$$p = \frac{sin^2\alpha}{1 + cos^2\alpha}, \tag{2.29}$$

en particulier, $p = 0$ si $\alpha = 0$ et $p = 1$ si $\alpha = \frac{\pi}{2}$. L'intensité du faisceau est:

$$I(\alpha) = I_0\frac{(1 + cos^2\alpha)}{2}. \tag{2.30}$$

[1]En effet, les ordres de grandeur dans le cadre de ce modèle montrent que l'extension du mouvement du barycentre des électrons (de l'ordre du diamètre de l'atome, c'est à dire de l'ordre de l'Ångstron) est très petite devant la longueur d'onde de la lumière rayonnée (de l'ordre de micron).

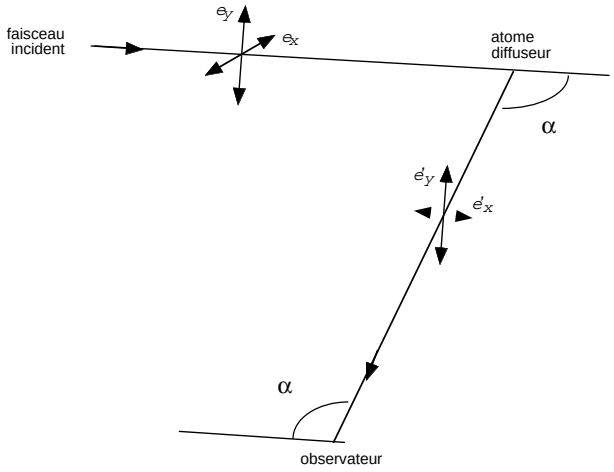

Figure 2.3: La diffusion d'un faisceau par un atome est un mécanisme polarisant. Le taux de polarisation et l'intensité dépendent de la direction d'observation.

Plus généralement, dans le cas d'une excitation anisotrope (partiellement directive), l'énergie du rayonnement réémis n'est pas distribuée de manière isotrope. Ceci se traduit aussi par une polarisation du rayonnement réémis par l'atome ou l'ion. Cette polarisation est bien la signature d'une excitation anisotrope.

2.3.2 Description quantique

D'un point de vue quantique, un rayonnement isotrope est un mélange incohérent statistiquement équilibré de photons (le nombre de photons dans chaque état est le même pour tous les états). Ce champ de rayonnement isotrope excite de la même façon tous les sous-niveaux Zeeman d'un même niveau $|nlJ>$. Pour un atome excité par ce rayonnement isotrope, les sous-niveaux Zeeman seront peuplés de façon statistiquement égale, et par la suite, le rayonnement réémis dans n'importe quelle direction est non polarisé.

Par contre sous l'effet d'un rayonnement naturel anisotrope les différents sous-niveaux Zeeman ne sont plus peuplés identiquement (seules les populations correspondants aux sous-niveaux de $|nlJM_J>$ et $|nlJ-M_J>$ sont identiques) et des cohérences entre ces sous-niveaux apparaissent: on appelle l'ensemble de ces phénomènes "polarisation atomique". A cause de cette polarisation atomique, la lumière réémis par l'atome est polarisée. On peut dire qu'il s'agit d'un "transfert d'ordre" du rayonnement anisotrope vers l'atome (Trujillo Bueno 2001).

La création de l'ordre au sein de l'atome est à l'origine de la polarisation atomique. Le second spectre solaire est le résultat d'une diffusion, par des atomes, ions et molécules, d'un rayonnement anisotrope provenant des couches internes du soleil. Le phénomène de l'*assombrissement centre − bord* est à l'origine de cette anisotropie de la lumière.

2.4 Assombrissement centre bord

L'assombrissement centre-bord peut être expliqué en étudiant, de manière approchée, un rayonnement monochromatique qui émerge de l'atmosphère du soleil à une fréquence ν. Pour cela, on se propose de déterminer une expression approchée de la solution formelle de l'équation de transfert de rayonnement au photosphère solaire.

L'émissivité monochromatique ϵ_ν est définie comme étant la puissance émise par unité d'angle solide, par unité de fréquence et par unité de volume. L'absorption monochromatique k_ν est définie de la manière suivante: $k_\nu\ I_\nu$ est la puissance absorbé par unité d'angle solide, par unité de fréquence et par unité de volume, en se propageant dans la direction d'observation. k_ν est homogène à l'inverse d'une longueur.

Bien sûr, étant donné que le rayonnement ne se propage pas dans le vide, l'intensité spécifique I_ν n'est pas constante: l'émission ajoute de l'énergie et l'absorption la diminue. La variation de I_ν, à travers une distance ds sur la trajectoire de la lumière, est

$$dI_\nu = (-k_\nu I_\nu + \epsilon_\nu)ds. \tag{2.31}$$

On introduit

$$d\tau_\nu = -k_\nu ds \quad \text{et} \quad \tau_\nu = -\int k_\nu ds, \tag{2.32}$$

τ_ν est l'épaisseur optique, le signe (-) implique que τ_ν diminue en s'approchant de l'observateur. On obtient ainsi l'équation du transfert sous sa forme ordinaire:

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = I_\nu - S_\nu, \tag{2.33}$$

$S_\nu = \epsilon_\nu\ /\ k_\nu$ est ce qu'on appelle la fonction source. On note que s'ils existent d'autres processus qui contribuent à la variation de l'intensité spécifique I_ν, il faut les prendre en compte dans l'équation de transfert.

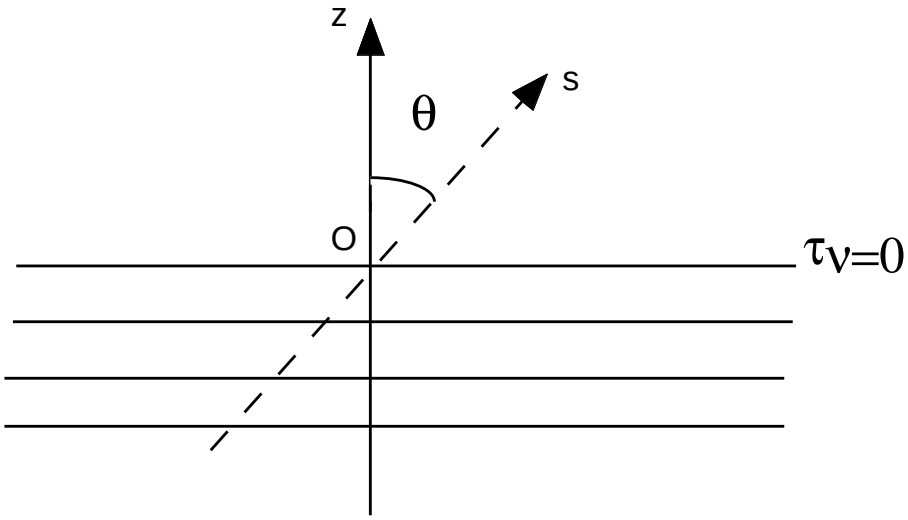

Figure 2.4: Approximation de l'atmosphère plan-parallèle

Dans le cadre de notre travail, pour décrire l'atmosphère du soleil, on adopte l'approximation d'un milieu stratifié, c'est-à-dire que les propriétés des quantités qu'on étudie ne dépendent que de la profondeur z mesurée a partir d'une origine quelconque. Cette approximation est bien justifiée car l'épaisseur de l'atmosphère est beaucoup plus petite que le rayon du soleil. Les propriétés physiques comme l'intensité spécifique, l'absorption, la température, ... sont alors constantes dans chacun des plans parallèles (Figure 2.4). La profondeur optique τ_ν est définie dans la direction de la normale. L'équation du transfert pour un rayonnement faisant un angle θ avec la normale aux plans parallèles (Figure 2.4), est donc:

$$cos\theta \frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = I_\nu - S_\nu, \tag{2.34}$$

en introduisant $\mu = cos\theta$ et en multipliant l'équation (2.34) par $\exp(-\frac{\tau_\nu}{\mu})$, on obtient:

$$\frac{d(\exp(-\frac{\tau_\nu}{\mu})\ I_\nu)}{d\tau_\nu} = -S_\nu \frac{\exp(-\frac{\tau_\nu}{\mu})}{\mu} \tag{2.35}$$

ce qui donne, en intégrant entre deux épaisseurs optiques $\tau_{\nu 1}$ et $\tau_{\nu 2}$,

$$I_\nu(\tau_{\nu_2}) exp(-\frac{\tau_{\nu_2}}{\mu}) - I_\nu(\tau_{\nu_1}) exp(-\frac{\tau_{\nu_1}}{\mu}) = -\int_{\tau_{\nu 1}}^{\tau_{\nu 2}} S_\nu \exp(-\frac{\tau_\nu}{\mu}) \frac{d\tau_\nu}{\mu}. \tag{2.36}$$

En considérant les conditions aux limites:

- pas de radiation incidente sur la surface: $I_\nu\ (\mu < 0, \tau_\nu = 0) = 0$
- la radiation à $\tau_\nu = \infty$ reste finie,

l'intensité à la surface est:

$$I_\nu(\tau_\nu = 0) = \int_0^\infty S_\nu \exp(-\frac{\tau_\nu}{\mu}) \frac{d\tau_\nu}{\mu}. \tag{2.37}$$

L' équation (2.37) est seulement une solution formelle, on a besoin de connaître la fonction source S_ν en fonction de l'épaisseur optique τ_ν pour toutes les fréquences pour déterminer concrètement l'intensité émergente $I_\nu(\tau_\nu = 0)$. Dans l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local (ETL), la fonction source S_ν est donnée par la fonction de Planck B_ν.

L'expression (2.37) de $I_\nu(\tau_\nu = 0)$ nous permet de comprendre qualitativement le phénomène d'assombrissement centre-bord. On a montré que l'intensité émergente est approximativement égale à la fonction source à $\tau_\nu = \mu$ (approximation d'Eddington-Barbier). Les couches profondes ($\tau_\nu > \mu$) ne contribuent pratiquement pas à la radiation émergente.

Suivant la normale à l'atmosphère, qui correspond à $\mu \sim 1$ (centre du soleil), on atteint des couches profondes ($\tau_\nu \sim 1$) où la température est élevée, l'intensité qui arrive aux couches externes atteint son maximum. Par contre, au bord ($\mu \sim 0$) on n'a accès qu'aux couches superficielles ($\tau_\nu \sim 0$) plus froides, ce qui correspond à une intensité plus faible. Cela a une double conséquence:

1. le rayonnement observé au centre du soleil est plus intense que celui observé au bord, c'est l'assombrissementcentre-bord,
2. un atome, ion ou molécule reçoit plus de rayonnement le long de la verticale que dans les directions horizontales: ce rayonnement est donc anisotrope.

2.5 L'effet Hanle

C'est Wilhelm Hanle de l'Université de Göttingen qui publia la première interprétation correcte concernant l'effet d'un champ magnétique faible sur la polarisation linéaire de la raie spectral à 2537 Å émise par une vapeur de mercure illuminée par un rayonnement anisotrope (Hanle 1923; Hanle 1924). Par rapport au cas d'une diffusion en l'absence de champ magnétique, un champ magnétique faible détruit, partiellement où complètement, la polarisation de la lumière émise et produit une rotation du plan de polarisation linéaire: c'est ce qu'on appelle l'effet Hanle. L'effet Hanle n'est donc observable que si l'on observe des raies polarisées en l'absence de champ.

2.5.1 L'effet Hanle: interprétation classique

Une première interprétation de ce phénomène peut être fournie par la théorie classique. Nous considérons un atome classique excité de façon permanente par une onde monochromatique.

Nous nous plaçons dans le cas d'un faisceau non polarisé se propageant dans une seule direction à la fréquence de transition atomique ν. Mais les conclusions qu'on va tirer sont également valables pour le cas réaliste d'un rayonnement naturel partiellement directif.

Nous reprenons le cas de la Figure 2.3 avec $\alpha = \frac{\pi}{2}$ (Figure 2.5): distinguons les deux dipôles excités de manière équiprobable, par les deux composantes suivant $\vec{e}_x$ et $\vec{e}_y$, du champ électrique du faisceau. Ces deux dipôles oscillent donc le long de $\vec{e}_x$ et $\vec{e}_y$. L'amplitude de vibration, de chacun des dipôles vibrant à la fréquence ν, est amortie avec une constante d'amortissement γ (nous notons γ, la constante d'amortissement, qui est l'inverse de la durée de vie τ qu'il ne faut pas confondre avec l'épaisseur optique notée aussi τ) pour tenir compte de la durée de vie finie du niveau supérieur de la transition.

Évidemment, puisque la ligne de visée est parallèle à $\vec{e}_x$, ce n'est pas possible de détecter le rayonnement émis par le dipôle qui vibre dans cette même direction $\vec{e}_x$. À $\alpha = \frac{\pi}{2}$, on observe un rayonnement polarisé linéairement le long de $\vec{e}_y$ et on notera $p_{\max}$ son taux de polarisation.

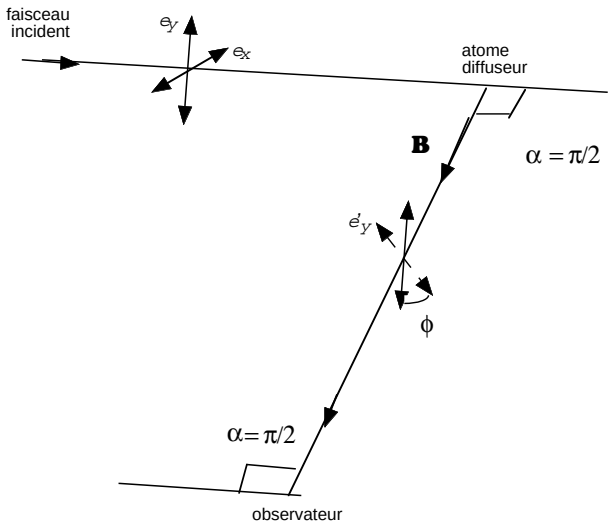

Figure 2.5: Précession du dipôle autour du vecteur champ magnétique $\vec{B}$, qui conduit à la dépolarisation et à la rotation du direction de la polarisation, d'un angle ϕ, du rayonnement émis par le dipôle.

Maintenant on introduit un champ magnétique parallèle à la direction d'observation (Figure 2.5). Les électrons et donc le dipôle subissent un mouvement de précession, à la fréquence de Larmor $\frac{\omega_L}{2\pi}$, autour de la direction du champ magnétique. L'effet combiné de la précession et de l'amortissement conduit à la dépolarisation et à la rotation de la direction de polarisation du rayonnement émis par le dipole (Figure 2.5). Le taux de polarisation p et la rotation ϕ ont été calculé par Breit en 1933 (Mitchell & Zemansky 1934):

$$\begin{aligned} p &= \frac{p\max}{1 + (2\omega_L \tau)^2} \\ tg2\phi &= 2\omega_L \tau. \end{aligned} \tag{2.38}$$

Dans le cas où le champ magnétique est parallèle à la direction de vibration du dipôle, il n'y aura pas de précession et par conséquent aucune rotation n'est introduite par ce champ sur le rayonnement émis par ce dipôle.

Si le vecteur champ magnétique est microturbulent, sa direction en un point est complètement indépendante de sa direction en un autre point. À chaque point P_i le vecteur champ magnétique fait tourner la direction de la polarisation d'un angle ϕ_i. La moyenne, de toutes les

rotations incohérentes ϕ_i associées aux différentes orientations du vecteur champ magnétique est zéro. Ce dernier cas se présente dans le cas intéressant des raies du second spectre solaire.

L'effet Hanle, c'est-à-dire la variation de la polarisation linéaire de la raie, est sensible à l'intensité du champ magnétique si la fréquence de Larmor est de l'ordre de grandeur de l'inverse du temps caractéristique de l'amortissement de l'oscillateur (Mitchell & Zemansky 1934).

2.5.2 L'effet Hanle: interprétation quantique

D'un point de vue quantique, la diffusion d'un rayonnement anisotrope, par un atome, crée des cohérences entre les sous-niveaux Zeeman et un déséquilibre entre leurs populations. Par conséquent, le rayonnement réémis par cet atome est polarisé. Un champ magnétique, présent lors de la formation de ce rayonnement, détruit partiellement les cohérences entre les sous-niveaux Zeeman de l'atome ce qui implique un changement des paramètres de polarisation. On observe une diminution du taux de polarisation linéaire et une rotation de la direction de polarisation.

Le calcul des éléments diagonaux et non-diagonaux de la matrice densité, décrivant l'état de l'atome et dont le formalisme sera détaillé dans le chapitre prochain (par exemple, voir aussi, Bommier 1977 et Bommier & Sahal-Bréchot 1978), permet une détermination quantitative du champ magnétique. Dans le chapitre (8) nous allons se placer dans la base, dite de tenseurs irréductibles, pour calculer les éléments de la matrice densité.

L'effet Hanle est sensible à l'intensité d'un champ magnétique si $\omega_L \tau \sim 1$ (τ est la durée de vie du niveau supérieur de la transition). On peut déterminer l'intensité du champ magnétique si $0.1 < \omega_L \tau < 10$. Ce qui veut dire qu'on peut mesurer des champs d'intensité voisine de B_0 défini par (Trujillo Bueno 2001)

$$8.79 \times 10^6 B_0(\text{Gauss}) g = \tau \tag{2.39}$$

g est le facteur de Landé du niveau supérieur de la transition. Pour avoir une estimation rapide des valeurs des champs magnétiques pour lesquels l'effet Hanle est sensible, on peut omettre le facteur 8.79 pour retenir la formule approximative,

$$10^7 B_0(\text{Gauss}) g \sim \tau(s^{-1}). \tag{2.40}$$

Pour un champ $B >> B_0$, dirigé dans la direction de l'observation, les sous-niveaux Zeeman, élargis à cause de leur durée de vie finie γ, sont séparés et les cohérences deviennent négligeables: le rayonnement est complètement dépolarisé. Dans d'autres directions d'observations, non parallèles à la direction du champ magnétique, le rayonnement émis est encore polarisé mais les deux paramètres de la polarisation linéaire (taux et direction) ne dépendent que de la direction du champ et pas de son intensité.

D'une façon générale, pour déterminer quantitativement le champ magnétique via l'effet Hanle il faut mesurer la polarisation linéaire complète (I, Q, U) et la comparer avec la polarisation théorique calculée en modélisant la formation de la raie observée en présence de champ magnétique (chapitre 8).

Dans notre cas (second spectre solaire), la direction de polarisation est tangentielle au bord du soleil et le taux de polarisation linéaire est égal à Q/I où Q est défini dans référentiel du bord solaire. U/I, taux de polarisation linéaire à 45 degrés du bord, est nul, cela veut dire qu'il n'y a pas de rotation du plan de polarisation. Le champ magnétique est turbulent.

L'analyse, en terme de champ magnétique dans les régions calmes[2], de ces taux, néces-

[2]Les durées de vie des raies du second spectre solaire sont de l'ordre de $10^{-7} - 10^{-9}$s, ce qui correspond à B_0 de l'ordre de 1 à 100 (Gauss) (éqution 2.40). L'effet Hanle est donc particulièrement adapté à la mesure de faible champ magnétique turbulent dans les régions calmes solaires (Stenflo et al. 1982).

site la résolution des équations couplées d'équilibre statistique et du transfert de rayonnement polarisé.

Chapitre 3

Équations de l'équilibre statistique et définition des taux de dépolarisation et de transfert de polarisation

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, on introduit le formalisme de la matrice densité, étant donné son grand intérêt dans l'étude de la lumière polarisée émise par un grand nombre d'atomes qui ne sont pas tous dans le même état. La base des opérateurs tensoriels irréductibles (OTI), qui est particulièrement adaptée à notre contexte d'analyse de la polarisation observée, est également présentée. Ce chapitre est aussi consacré à définir les constantes physiques qu'on se propose de calculer avec notre méthode semi-classique. Le sens physique de ces quantités est donné pour aboutir à une formulation du problème.

3.2 Matrice densité atomique

La théorie de la mécanique quantique nous apprend qu'à un instant t, l'état d'un système physique (par exemple un atome émetteur A) est décrit par un vecteur-ket (état pur) $|\psi_{(A)}(t)\rangle$. Si $\{|nJM_J\rangle\}$ est une base orthonormée de l'espace des états, l'état du système, $|\psi_{(A)}(t)\rangle$, peut s'écrire à tout moment comme combinaison linéaire des vecteurs de cette base:

$$|\psi_{(A)}(t)\rangle = \sum_{nJM_J} a_{nJM_J}(t)|nJM_J\rangle \tag{3.1}$$

La probabilité de trouver l'atome dans l'état $|nJM_J\rangle$ est donnée, dans la base standard $\{|nJM_J\rangle\}$, par:

$$|\langle nJM_J|\psi_{(A)}(t)\rangle|^2 = \sum_{n'J'M'_J} a_{nJM_J}(t)a^*_{n'J'M'_J}(t)\langle nJM_J|n'J'M'_J\rangle = |a_{nJM_J}(t)|^2. \tag{3.2}$$

La valeur moyenne d'une observable $\mathcal{O}$ caractérisant le système étudié, dont les éléments de matrice sont donnés par $\langle nJM_J|\mathcal{O}|n'J'M'_J\rangle$, est:

$$\langle\mathcal{O}(t)\rangle = \langle\psi_{(A)}(t)|\mathcal{O}|\psi_{(A)}\rangle = \sum_{nJM_J,n'J'M'_J} a_{nJM_J}(t)a^*_{n'J'M'_J}(t)\langle nJM_J|\mathcal{O}|n'J'M'_J\rangle. \tag{3.3}$$

L'état de l'atome émetteur (A) peut être aussi caractérisé par sa matrice densité $\rho^A(t)$ définie dans le cas pur par:

$$\rho^A(t) = |\psi_{(A)}(t)\rangle\langle\psi_{(A)}(t)| = \sum_{nJM_J,n'J'M'_J} a_{nJM_J}(t)a^*_{n'J'M'_J}(t)|nJM_J\rangle\langle n'J'M'_J|. \tag{3.4}$$

En se plaçant dans la représentation de la matrice densité, on peut retrouver la probabilité de trouver l'atome dans l'état $|nJM_J\rangle$ donnée par l'équation (3.2). En effet cette probabilité est égale à l'élément diagonal correspondant à l'état $|nJM_J\rangle$:

$$\langle nJM_J|\rho^A(t)|nJM_J\rangle = |a_{nJM_J}(t)|^2 \tag{3.5}$$

L'intérêt de la matrice densité est qu'elle permet une description plus générale que celle donnée par une fonction d'onde, car elle s'applique aussi bien au cas où tous les atomes du système sont dans le même état (état pur), qu'à celui du mélange statistique d'états.

Si l'on considère un ensemble de N systèmes identiques et indépendants (dans notre cas un ensemble d'atomes émetteurs de la lumière polarisée), on défini la matrice densité du système total comme étant la moyenne des matrices densités des systèmes individuels:

$$\bar{\rho}^A(t) = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} \rho^{A_k}(t). \tag{3.6}$$

La matrice densité $\bar{\rho}^A$ permet alors, lorsqu'on ne s'intéresse qu'au comportement global du système, ce qui est le cas ici, de décrire l'état d'un "atome moyen". L'élément diagonal $\langle nJM_J|\bar{\rho}^A(t)|nJM_J\rangle$ est la population moyenne du niveau $|nJM_J\rangle$. L'élément non-diagonal correspond à la moyenne de la cohérence entre les états $|nJM_J\rangle$ et $|n'J'M'_J\rangle$. Par contre ce n'est pas possible de définir une fonction d'onde (vecteur-ket) moyenne décrivant cet ensemble de i systèmes identiques; on ne peut définir que la fonction d'onde totale du système qui est un produit des fonctions d'onde individuelles.

On note que, dans la base $|nJM_J\rangle$, il n'y a pas de différence de sens physique entre les éléments diagonaux (populations) et les éléments non-diagonaux (cohérences); la séparation entre populations et cohérences dépend du choix de la base: quand on change de système d'axes les populations peuvent se transformer en cohérences et vice versa.

3.3 Opérateurs tensoriels irréductibles (OTI) et équations d'équilibre statistique (EES)

3.3.1 Opérateurs tensoriels irréductibles (OTI)

Le développement de la matrice densité sur la base des OTI est dicté par les symétries angulaires du problème étudié. La loi de transformation des OTI dans une rotation est identique à la loi de transformation des harmoniques sphériques: cette base est particulièrement adaptée à l'étude des problèmes à symétrie sphérique ou axiale. Cette base est donc adaptée à notre problème et permet de simplifier l'écriture des équations d'équilibre statistique (EES). Les quantités exprimées dans cette base ont un sens physique qui ne dépend pas du système d'axes choisi.

La base des OTI en fonction des opérateurs dyadiques $|n'l'J'M'_J\rangle\,\langle n'l'J'M'_J|$ est défini par la relation:

$$^{nlJ,n'l'J'}T^k_q = \sum_{M_J,M'_J} (-1)^{J-M_J}\sqrt{2k+1}\begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M_J & q & M'_J \end{pmatrix} |nlJM_J\rangle\langle n'l'J'M'_J|, \tag{3.7}$$

où l'entité entre parenthèses est un coefficient $3j$. D'après les règles de sélection, cet opérateur existe pour $|J-J'| \leq k \leq J+J'$, $-k \leq q \leq k$ et $q=-(M_J-M'_J)$.

La matrice densité de "l'atome moyen" $\bar{\rho}^A$, que l'on notera simplement ρ par la suite de cette exposé, est un opérateur de l'espace des états et peut se décomposer sur la base des opérateurs dyadiques:

$$\rho = \sum_{nlJM_J,n'l'J'M'_J} {}^{nlJ,n'l'J'}\rho_{M_J,M'_J} |nlJM_J\rangle\langle n'l'J'M'_J| \tag{3.8}$$

ou sur la base des OTI:

$$\rho = \sum_{nlJ,n'l'J',kq} {}^{nlJ,n'l'J'}\rho_q^k \; {}^{nlJ,n'l'J'}T_q^k \tag{3.9}$$

Les relations de passage d'une base à l'autre sont:

$${}^{nlJ,n'l'J'}\rho_q^k = \sum_{M_J,M'_J} \sqrt{2k+1}(-1)^{J-M_J} \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M_J & q & M'_J, \end{pmatrix} {}^{nlJ,n'l'J'}\rho_{M_J,M'_J} \tag{3.10}$$

et,

$${}^{nlJ,n'l'J'}\rho_{M_J,M'_J} = \sum_{k,q} \sqrt{2k+1}(-1)^{J-M_J} \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M_J & q & M'_J \end{pmatrix} {}^{nlJ,n'l'J'}\rho_q^k. \tag{3.11}$$

Dans la base des OTI l'hermicité de la matrice densité ρ se traduit par la relation suivante:

$$({}^{nlJ,n'l'J'}\rho_q^k)^* = (-1)^{J-J'-q} \; {}^{nlJ,n'l'J'}\rho_q^k. \tag{3.12}$$

Les éléments de la matrice densité dans la base des OTI sont généralement appelés termes ou éléments multipolaires.

On peut donner une signification physique à certains de ces termes multipolaires. Les termes d'ordre 0, ${}^{nlJ,nlJ}\rho_0^0$, s'expriment en fonction des populations des sous-niveaux Zeeman ${}^{nlJ,nlJ}\rho_{M_J,M_J}$ par:

$${}^{nlJ,nlJ}\rho_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \sum_{M_J} {}^{nlJ,nlJ}\rho_{M_J,M_J} = \frac{1}{\sqrt{2J+1}} N_{nlJ} \tag{3.13}$$

$\sqrt{2J+1} \;\; {}^{nlJ,nlJ}\rho_0^0$ est donc la population du niveau (nlJ).

Les termes d'ordre 1, ${}^{nlJ,nlJ}\rho_q^1$, sont des combinaisons linéaires des composantes du moment angulaire moyen pour le niveau (nlJ) et portent le nom de termes d'orientation. Ils sont associés à la polarisation circulaire du rayonnement.

Quant aux termes d'ordre 2, ${}^{nlJ,nlJ}\rho_q^2$, ce sont des combinaisons quadratiques des composantes du moment angulaire qui portent le nom de termes d'alignement. Ils sont associés à la polarisation linéaire du rayonnement et ce sont eux qui vont principalement nous intéresser dans ce travail.

L'intérêt de la base des OTI apparaît déjà par le fait que certains termes multipolaires sont directement associés à la population du niveau (nlJ) et que l'on a donc pas besoin de connaître les populations de chaque sous-niveau Zeeman. On note aussi que le passage vers le cas limite où le phénomène de polarisation de la lumière est négligé se fait par une simple restriction à l'ordre $k=0$.

Les collisions isotropes agissent sur les éléments multipolaires ${}^{nlJ,nlJ'}\rho_q^k$, dits termes de cohérences Zeeman ($q \neq 0$), de la même façon que sur ${}^{nlJ,nlJ'}\rho_0^k$. En plus, dans l'hypothèse où les différents niveaux d'énergie sont complètement séparés, les termes de cohérences entre niveaux ${}^{nlJ,nlJ'}\rho_0^k$ avec $(nlJ) \neq (nlJ')$ sont nuls.

Il ne nous reste à considérer que les termes ${}^{nlJ,nlJ}\rho_0^k = {}^{nlJ}\rho_0^k$ qui s'expriment en fonction des populations N_{nlJM_J} des sous-niveaux Zeeman (equation 3.10):

$$ {}^{nlJ}\rho_0^k = \sum_{M_J} \sqrt{2k+1}(-1)^{J-M_J} \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M_J & 0 & M'_J, \end{pmatrix} {}^{nlJ}\rho_{M_J} \tag{3.14} $$

En particulier:

$$ \begin{aligned} {}^{nlJ}\rho_0^1 &= \frac{3^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \sum_{M_J} M_J \; N_{nlJM_J} \\ &= \frac{3^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \sum_{M_J>0} M_J \; N_{nlJM_J} + \sum_{M_J<0} M_J \; N_{nlJM_J} \\ &= \frac{3^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \sum_{M_J>0} M_J \; (N_{nlJM_J} - N_{nlJ-M_J}) \end{aligned} \tag{3.15} $$

et

$$ {}^{nlJ}\rho_0^2 = \frac{5^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)(2J+3)(2J-1)}} \sum_{M_J} (3M_J^2 - J(J+1)) \; N_{nlJM_J} \tag{3.16} $$

3.3.2 Équations d'équilibre statistique (EES)

On considère l'équilibre statistique au sein des niveaux d'un atome soumis aux effets de plusieurs processus présents dans le milieu. Soit $(\frac{d\,{}^{nlJ}\rho_q^k}{dt})_i$ la variation de la matrice densité sous l'effet du processus i. Dans notre cadre de travail, i= collisions (avec des électrons, des atomes d'hydrogène), i= processus radiatifs et i= effet d'un champ magnétique. Les équations d'équlibre statistique (EES), décrivant l'effet de ces différents processus sur l'état interne de l'atome, s'écrivent sous la forme:

$$ \sum_i (\frac{d\,{}^{nlJ}\rho_q^k}{dt})_i = 0. \tag{3.17} $$

La largeur naturelle des niveaux de structure fine étant toujours petite devant la distance entre les différents niveaux, nous devrons résoudre les EES pour les niveaux (nlJ) (voir section 3.5 quand l'atome à un spin nucléaire)

Dans le chapitre 8, nous allons écrire explicitement les EES dans un cas particulier où nous étudions la formation de la raie polarisée SrI 4607 Å.

Le rayonnement naturel incident qui illumine l'atome émetteur ne transporte pas d'orientation et par conséquent aucune orientation ne peut être créée puisque les éléments multipolaires d'ordres k pairs sont alors découplés de ceux d'ordres k impair. Les EES se séparent en deux

sous-systèmes pour les valeurs paires et impaires de k. La solution du sous-système qui correspond aux valeurs de k impaires est:

$$^{nlJ}\rho_0^k = 0,\ k \text{ impair}, \tag{3.18}$$

ce qui veut dire aussi que $N_{nlJM_J} = N_{nlJ-M_J}$ (on peut remarquer cela facilement, pour $k = 1$, sur la troisième égalité de l'équation 3.15). En conséquence, aucun des niveaux des atomes n'est orienté, en d'autres termes: la moyenne du moment angulaire dans chaque niveau est identiquement nulle.

Pour une interprétation du second spectre solaire on a besoin seulement des taux d'ordres k pairs. Bien qu'un rayonnement ne transporte pas d'ordre tensoriel supérieur à k =2 (le photon est un boson de spin 1), les ordres pairs supérieurs à 2 (s'ils existent) doivent être pris en compte dans les EES pour interpréter la polarisation observée. En d'autres termes, même si on n'observe que la polarisation linéaire associée à l'ordre $k = 2$, les éléments de matrice d'ordre supérieur sont couplés aux éléments de matrice d'ordre k=0, 2 dans les EES et ne peuvent donc pas être ignorés dans le calcul de l'équilibre.

pour calculer la polarisation linéaire théorique et la comparer à la polarisation observée afin de calculer les valeurs du champ magnétique, nous avons besoin de tous les taux d'ordres k pairs qui existent.

3.4 Taux de dépolarisation et de transfert de polarisation

3.4.1 Position du problème

Nous considérons un ensemble d'atomes émetteurs (système étudié de matrice ρ) soumis aux interactions avec un bain d'atomes perturbateurs (atomes d'hydrogène dans notre cas). L'interaction entre le système et les atomes d'hydrogène est décrite par une "vitesse" de variation des éléments de la matrice densité $^{nlJ}\rho_0^k$ (voir, par exemple, Sahal-Bréchot 1977a),

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d\,^{nlJ}\rho_0^k}{dt}\right)_{coll} &= -D^k(nlJ,T)\,^{nlJ}\rho_0^k \\
&\quad -^{nlJ}\rho_0^k \sum_{J'\neq J} \zeta(nlJ \to nlJ',T) \\
&\quad + \sum_{J'\neq J} D^k(nlJ' \to nlJ,T)\,^{nlJ'}\rho_0^k \\
&\quad + \text{termes de quenching.}
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Pour les collisions avec les atomes neutres d'hydrogène, nous négligeons les termes de quenching associés aux transitions inélastiques entre deux niveaux de moments orbitaux l différents.

Pour évaluer la contribution des collisions avec les atomes neutres d'hydrogène dans l'équation pilote de variation de la matrice densité, il faut calculer les taux de dépolarisation $D^k(nlJ,T)$ et les taux de transfert de polarisation $D^k(nlJ \to nlJ',T)$. $\zeta(nlJ \to nlJ',T)$ sont les taux collisionnels de transfert de structure fine proportionnels à $D^0(nlJ' \to nlJ,T)$ (section 3.4.2, équation 3.34).

3.4.2 Taux de dépolarisation

$D^k(nlJ,T)$ est le taux de dépolarisation collisionnelle, d'ordre k, de l'état (nlJ). À chaque niveau de moment angulaire total J, sont liés $2J+1$ taux de dépolarisation indépendants $(0 \leq k \leq 2J)$.

Nous notons v la vitesse relative des atomes en collision et $\sigma^k(nlJ,v)$ la section efficace de dépolarisation. $D^k(nlJ,T)$ résulte d'une intégration, sur une distribution Maxwellienne de vitesses $f(v)$, de $[v \times \sigma^k(n\ l\ J,v)]$:

$$D^k(nlJ,T) = n_H \int_0^\infty \sigma^k(nlJ,v) v f(v) dv \tag{3.20}$$

avec

$$f(v) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\ (\frac{\mu}{kT})^{\frac{3}{2}}\ v^2 \exp(-\frac{\mu v^2}{2kT}), \tag{3.21}$$

μ est la masse réduite du système.

$\sigma^k(nlJ,v)$ est une combinaison linéaire des sections efficaces de collisions entre les sous-niveaux Zeman $\sigma(nlJM_J \rightarrow nlJM'_J,v)$. En effet, la formule (20) de (Sahal-Bréchot 1977a) dans le cas $k=k'$ peut s'écrire, en utilisant nos notations,

$$\begin{aligned}
\sigma^k(nlJ,v) &= (2k+1)\sum_{M'_J}\sum_{M_J\neq M'_J}(-1)^{2J-2M_J}\begin{pmatrix} J & k & J \\ -M_J & 0 & M_J \end{pmatrix}^2 \sigma(nlJM_J \rightarrow nlJM'_J,v) \\
&- (2k+1)\sum_{M_J}\sum_{M'_J\neq M_J}(-1)^{2J-M_J-M'_J}\begin{pmatrix} J & k & J \\ -M_J & 0 & M_J \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J & k & J \\ -M'_J & 0 & M'_J \end{pmatrix} \\
&\quad \times\sigma(nlJM_J \rightarrow nlJM'_J,v),
\end{aligned} \tag{3.22}$$

aussi:

$$\begin{aligned}
\sigma^k(nlJ,v) &= (2k+1)\sum_{M_J,M'_J}(-1)^{2J-2M_J}\begin{pmatrix} J & k & J \\ -M_J & 0 & M_J \end{pmatrix}^2 \sigma(nlJM_J \rightarrow nlJM'_J,v) \\
&- (2k+1)\sum_{M_J,M'_J}(-1)^{2J-M_J-M'_J}\begin{pmatrix} J & k & J \\ -M_J & 0 & M_J \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J & k & J \\ -M'_J & 0 & M'_J \end{pmatrix} \\
&\quad \times\sigma(nlJM_J \rightarrow nlJM'_J,v)
\end{aligned} \tag{3.23}$$

On peut exprimer le premier terme de l'équation (3.23) plus simplement. En effet,

– $(-1)^{2J-2M_J} = 1$

– la moyenne, sur toutes les directions des collisions isotropes, de $\sigma(nlJM_J \rightarrow nlJM'_J,v)$ peut s'écrire sous la forme[1]:

$$\sum_{M'_J}\sigma(nlJM_J \rightarrow nlJM'_J,v) = \sigma(nlJ,v), \tag{3.25}$$

[1] $\sigma(nlJ,v)$ est la section efficace élastique du niveau $|nlJ\rangle$ à la vitesse relative v, on peut aussi l'écrire comme une moyenne sur les états initiaux M_J:

$$\sigma(nlJ,v) = \frac{1}{2J+1}\sum_{M_J,M'_J}\sigma(nlJM_J \rightarrow nlJM'_J,v). \tag{3.24}$$

car la moyenne sur tous les états M'_J est équivalent à une moyenne sur toutes les directions de collisions. Cette propriété sera utilisée plus tard dans le premier terme de l'équation (5.45).

– en utilisant les règles de sommation des coefficients $3j$, on a

$$(2k+1)\sum_{M_J,M'_J}\begin{pmatrix} J & k & J \\ -M_J & 0 & M_J \end{pmatrix}^2 = 1. \tag{3.26}$$

On obtient alors:

$$\sigma(nlJ,v) = (2k+1)\sum_{M_J,M'_J}(-1)^{2J-2M_J}\begin{pmatrix} J & k & J \\ -M_J & 0 & M_J \end{pmatrix}^2 \sigma(nlJM_J \to nlJM'_J, v). \tag{3.27}$$

Finalement, la section efficace de dépolarisation peut s'écrire,

$$\begin{aligned}\sigma^k(nlJ,v) = \sigma(nlJ,v) \quad - \quad & (2k+1)\sum_{M_J,M'_J}(-1)^{2J-M_J-M'_J}\begin{pmatrix} J & k & J \\ -M_J & 0 & M_J \end{pmatrix} \\ & \times\begin{pmatrix} J & k & J \\ -M'_J & 0 & M'_J \end{pmatrix}\sigma(nlJM_J \to nlJM'_J, v).\end{aligned} \tag{3.28}$$

Les taux de dépolarisation $D^k(nlJ,v)$, obtenus après intégration sur les vitesses de $[v \times \sigma^k(nlJ,v)]$, peuvent donc être exprimés de façon analogue à l'équation (3.28), soit:

$$\begin{aligned}D^k(nlJ,T) = \zeta(nlJ,T) \quad - \quad & (2k+1)\sum_{M_J,M'_J}(-1)^{2J-M_J-M'_J}\begin{pmatrix} J & k & J \\ -M_J & 0 & M_J \end{pmatrix} \\ & \times\begin{pmatrix} J & k & J \\ -M'_J & 0 & M'_J \end{pmatrix}\zeta(nlJM_J \to nlJM'_J, T).\end{aligned} \tag{3.29}$$

$D^k(nlJ,T)$ est une combinaison linéaire des taux collisionnels entre sous-niveaux Zeeman $\zeta(nlJM \to nlJM')$ avec les mêmes coefficients que ceux de l'équation (3.28).

En particulier,

– $D^0(nlJ,T)$ est le taux de destruction de la population, on peut vérifier qu'il est identiquement nul: ceci est du au fait que les collisions élastiques (dans un même niveau (nlJ)) ne changent pas la population du niveau (nlJ),

– $D^1(nlJ,T)$ est le taux de destruction de l'orientation (polarisation circulaire), il est donné, par exemple dans le cas de $J=1$ et $J=3/2$, par (Gordeyev et al. 1969; Sahal-Bréchot 1977a)

$$\begin{aligned}D^1(n\ 1\ 1) &= \zeta(10 \to 1\pm 1) + 2\zeta(1\mp 1 \to 1\pm 1) \\ D^1(n\ 1\ \tfrac{3}{2}) &= \frac{1}{5}\zeta(\frac{3}{2}\frac{-1}{2} \to \frac{3}{2}\frac{1}{2}) + \frac{2}{5}\zeta(\frac{3}{2}\frac{3}{2} \to \frac{3}{2}\frac{1}{2}) \\ &+ \frac{8}{5}\zeta(\frac{3}{2}\frac{-3}{2} \to \frac{3}{2}\frac{1}{2}) + \frac{9}{5}\zeta(\frac{3}{2}\frac{-3}{2} \to \frac{3}{2}\frac{3}{2})\end{aligned} \tag{3.30}$$

– $D^2(nlJ,T)$ est le taux de destruction de l'alignement (polarisation linéaire) qui est intéressant dans l'interpétation du second spectre solaire, on a (Gordeyev et al. 1969; Sahal-Bréchot 1977a):

$$\begin{aligned}D^2(n\ 1\ 1) &= 3\zeta(10 \to 1\pm 1), \\ D^2(n\ 1\ \tfrac{3}{2}) &= 2\,\zeta(\frac{3}{2}\frac{3}{2} \to \frac{3}{2}\frac{1}{2}) + 2\,\zeta(\frac{3}{2}\frac{-1}{2} \to \frac{3}{2}\frac{1}{2}) \\ &+ 2\,\zeta(\frac{3}{2}\frac{-3}{2} \to \frac{3}{2}\frac{1}{2})\end{aligned} \tag{3.31}$$

3.4.3 Taux de transfert de polarisation

Pour une étude complète de l'effet des collisions isotropes avec les atomes neutres d'hydrogène, sur la matrice densité de l'atome émetteur (équation 3.19), il faut tenir compte aussi des processus de transfert de polarisation entre niveaux atomiques ($nlJ \rightarrow nlJ'$).

$D^k(nlJ \rightarrow nlJ', T)$ est le taux de transfert de polarisation, d'ordre k, entre les niveaux (nlJ) et (nlJ'). L'ordre tensoriel k est compris entre zéro et $2J$ si $(J < J')$ (si par contre $J > J'$, $0 \leq k \leq 2J'$).

Les taux $D^k(nlJ \rightarrow nlJ', T)$ résultent d'une intégration sur une distribution Maxwellienne de vitesses de de $[v \times \sigma^k(nlJ \rightarrow nlJ', v)]$. $\sigma^k(nlJ \rightarrow nlJ', v)$ est la section efficace du transfert de polarisation.

De même que dans le cas des taux de dépolarisation, $D^k(nlJ \rightarrow nlJ', T)$ est une combinaison linéaire des taux de transition collisionnelle entre sous-niveaux Zeeman $\zeta(nlJM_J \rightarrow nlJ'M'_J, T)(J \neq J')$ (Sahal-Bréchot 1977a):

$$\begin{aligned} D^k(nlJ \rightarrow nlJ', T) &= (2k+1) \sum_{M_J, M'_J} (-1)^{J+J'-M_J-M'_J} \begin{pmatrix} J & k & J \\ -M_J & 0 & M_J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J' & k & J' \\ -M'_J & 0 & M'_J \end{pmatrix} \\ &\times \zeta(nlJM_J \rightarrow nlJ'M'_J, T). \end{aligned} \tag{3.32}$$

En particulier:

$$D^0(nlJ \rightarrow nlJ', T) = \sqrt{\frac{2J+1}{2J'+1}} \zeta(nlJ \rightarrow nlJ', T), \tag{3.33}$$

3.5 Remarque importante

Dans certains cas, l'atome émetteur peut avoir un spin nucléaire, ce qui conduit à la décompostion des niveaux de structure fine en des niveaux atomiques hyperfins. L'importance de la structure hyperfine dans l'étude de la polarisation est discutée dans le cas de la raie coronale de l'hydrogène L_α par Bommier & Sahal-Bréchot (1982). Elles ont montré qu'il faut modéliser la formation de la raie polarisée, en résolvant les équations couplées de transfert de rayonnement et de l'équilibre statistique des niveaux atomiques hyperfins, dans le cas où les largeurs naturelle des niveaux hyperfins sont suffisamment petits devant les écarts entre ces niveaux. Dans le cas contarire, i.e. les intervalles des énergies entre niveaux hyperfins sont petits devant les largeurs naturelles et par conséquent ces niveaux ne sont pas séparés, on peut résoudre les EES seulement pour les niveaux de structure fine en ignorant les niveaux hyperfins. Ceci est lié à la relation d'incertitude temps-énergie de Heisenberg. Par exemple, pour les raies D du sodium, les niveaux hyperfins doivent être pris en compte dans les EES puisque l'inverse de la durée de vie, égale à 9.7 MHz (Gaupp 1982), est petit devant les écarts en fréquence entre niveaux hyperfins donnés dans la Table 4.1 (prochain chapitre): les taux de dépolarisation des niveaux hyperfins contribuent aux études de la polarisation et doivent être calculés. Les éléments de la matrice de transition entre niveaux atomiques hyperfins sont des combinaisons linéaires des éléments de matrice de transition entre niveaux de structure fine, parce que l'écart en fréquence entre niveaux hyperfins est très petit par rapport à l'inverse du temps de collision de sorte que la structure hyperfine est négligeable pendant la collision et donc le spin nucléaire est conservé (prochain chapitre, section 4.3.1).

Généralement, pour les raies du second spectre solaire, la structure hyperfine, si elle existe, doit être prise en compte en résolvant les EES.

Chapitre 4

Formalisme de la théorie des collisions adapté à notre problème

4.1 Introduction

L'étude de l'élargissement, du déplacement et de la dépolarisation des raies spectrales sous l'influence de perturbateurs neutres a déjà fait l'objet de nombreux travaux. Nous adoptons, comme la plus part des auteurs des travaux de nature semi-classique, l'approximation d'une trajectoire rectiligne. Dans notre cadre de travail l'approximation des impacts est valable. De plus, nous négligerons les structures fine et hyperfine durant la collision atome/ion-perturbateur.

Nous avons développé une nouvelle méthode semi-classique pour calculer des taux du dépolarisation et des taux de transfert de polarisation. Elle est largement inspirée de la théorie développée et appliquée avec succès aux élargissement des raies par collisions avec les atomes neutres d'hydrogène, dans les années 90, par Anstee, Barklem et O'Mara (Anstee 1992; Anstee & O'Mara 1991; Anstee & O'Mara 1995; Anstee et al. 1997; Barklem & O'Mara 1997; Barklem et al. 1998a; Barklem 1998b). Cette théorie qui porte le nom de théorie Anstee-Barklem-O'Mara (ABO), a été appliquée aux raies du spectre solaire.

4.2 Approximation des impacts

Nous nous plaçons dans l'approximation des impacts, où l'on ne considère que des collisions binaires, séparées et sans corrélation, caractérisées chacune par une vitesse $\vec{v}$ et un paramètre d'impact $\vec{b}$. L'effet global des collisions est calculé ensuite par une moyenne sur toutes les collisions possibles (chapitre 5). L'approximation des impacts est valable si la durée d'une collision τ qui est de l'ordre de $\frac{b_{typ}}{v}$, où b_{typ} est un paramètre d'impact typique est petite devant l'intervalle de temps moyen T entre deux collisions, qui est de l'ordre de $\frac{1}{n_H v \pi b_{typ}^2}$. La condition $\tau \ll T$ donne (voir, par exemple, Lamb & Haar 1971)

$$n_H \pi b_{typ}^3 \ll 1, \tag{4.1}$$

où n_H est la densité du perturbateur (ici l'hydrogène). Cette approximation est satisfaite dans l'atmosphère solaire où on a de faibles densités de perturbateurs ($n_H \sim 10^{17}\mathrm{cm}^{-3}$ et b_{typ} est de l'ordre de $10a_0$; a_0 est le rayon de Bohr, $a_0 \sim 0.5\ 10^{-8}$cm ce qui fait $n_H\ \pi\ b_{typ}^3 \sim 10^{-5}$).

4.3 Approximation d'une trajectoire rectiligne

Le modèle est de nature semi-classique, les états internes des atomes en collisions sont traités dans le cadre de la mécanique quantique alors qu'on considère la notion de trajectoire classique pour le mouvement relatif. L'interaction entre les deux particules est suffisamment faible pour ne pas dévier l'atome perturbateur, et donc la trajectoire de l'atome perturbateur

(hydrogène neutre) est rectiligne. Cette approximation est à l'origine d'oscillations des valeurs des probabilités de transition pour les petits paramètres d'impacts (Suzor 1973). En effet cette approximation prévoit que les deux atomes s'approchent plus qu'ils ne le font en réalité et les déphasages introduites sur les fonctions d'onde sont systématiquement augmentés. L'approximation de trajectoire rectiligne est validée par plusieurs travaux (cf. par exemple Smith et al. 1969, Dyne 1973 et Allard & Kielkopf 1982). À cause de ces oscillations, qui rendent l'intégration sur les petits paramètres d'impact difficile, on introduit un paramètre d'impact critique au dessous duquel on remplace la probabilité de transition par une valeur moyenne. La valeur du paramètre d'impact critique ainsi que la validité de cette approximation sont discutées plus loin.

4.4 Structures fine et hyperfine

Notre objectif est de proposer une méthode générale, c'est à dire qui puisse être appliquée à n'importe quel atome. Dans cette méthode, on a essayé de négliger, chaque fois que cela est possible, les parties de potentiel d'interaction qui sont spécifiques à un atome. Les structures fine et hyperfine sont propres à chaque atome. Comme nous allons le montrer, si on néglige l'interaction due aux structures fine et hyperfine (si elles existent) la précision de cette méthode est toujours raisonnable et la méthode reste générale.

On peut négliger la structure fine (resp. hyperfine) pendant la collision si le spin (resp. le spin nucléaire) n'a pas le temps de précesser pendant la collision. Ceci est vérifié si

$$\tau \, \Delta E_{FS} \ll 1, \tag{4.2}$$

et

$$\tau \, \Delta E_{HFS} \ll 1, \tag{4.3}$$

ΔE_{FS} et ΔE_{HFS} sont l'énergie de strucure fine et hyperfine respectivement et τ est la durée typique d'une collision.

Maintenant, nous allons montrer, sur l'exemple de l'atome du sodium, que les conditions (4.2) et (4.3) sont vérifiées. Cet exemple est particulièrement intéressant car on dispose de taux de chimie quantique que nous allons pouvoir comparer avec nos taux semi-classiques.

4.4.1 Structure fine

$\tau \sim \frac{b_{typ}}{v}$. Si on prend $b_{typ} = 10\ a_0$ et $v \sim 4.8 \times 10^{-3}$a.u., paramètre d'impact et vitesse relative typiques pour notre problème de collision avec une température du milieu voisine de $5000K$, $\tau \sim 2.08 \times 10^3$a.u.. Pour l'atome du sodium où $\Delta E_{FS} \simeq 0.78 \times 10^{-4}$a.u. on a $\tau \ \Delta E_{FS} \simeq 0.16 < 1$: la structure fine peut en général être négligée dans ce problème de collision à des températures solaires. Ce point a été discuté dans des travaux plus anciens (voir par exemple Roueff, 1974a, ainsi que les références en relation citées dans cet article).

Nous notons par S la matrice de diffusion qui relie l'état du système après collision à son état avant collision (voir la section 5.3 pour plus de détails concernant la matrice S). Pour éviter la confusion avec la matrice de diffusion S nous notons par $\vec{S}_s$ le spin total de l'atome perturbé. Cette notation est adoptée seulement dans ce paragraphe.

F	$\Delta E_{HFS}(^2P_{3/2})$	$\Delta E_{HFS}(^2S_{1/2})$
3	58.44	-
2	34.32	1772
1	15.86	-

Table 4.1: Les valeurs des énergies de séparation entre les niveaux F et $F-1$ de structure hyperfine. Ces valeurs sont données dans le cas de Na dans son état fondamental $3s\ ^2S_{1/2}$ (Ackermann 1966) et dans son état excité $3p\ ^2P_{3/2}$ (Gangrsky et al. 1998). Toutes les énergies sont données en MHz.

Négliger la structure fine pendant la collision, c'est écrire que la matrice de diffusion S est diagonale en S_s et que ses éléments ne dépendent pas de M_{S_s} (S_s est conservé). Nous notons $\vec{l}$ le moment orbital de l'électron de valence de l'atome perturbé et $\vec{J}$ le moment cinétique total. Nous avons: $\vec{J} = \vec{S_s} + \vec{l}$, $M_J = M_{S_s} + m_l$ et

$$|lJM_J\rangle = \sum_{M_{S_s},m_l} \langle S_s l M_{S_s} m_l | J M_J\rangle |l m_l\rangle |S_s M_{S_s}\rangle \tag{4.4}$$

où $\langle S_s l M_{S_s} m_l | J M_J\rangle$ est un coefficient Clebsch-Gordan. Ainsi l'élément de la matrice de diffusion

$$\begin{aligned}\langle lJM_J|S|l'J'M'_J\rangle = \sum_{M_{S_s},m_l,M'_{S_s},m'_l} & \langle S_s l M_{S_s} m_l|JM_J\rangle\langle S_s l' M'_{S_s} m'_l|J'M'_J\rangle \\ & \times\langle lm_l|\langle S_s M_{S_s}|S|S_s M'_{S_s}\rangle|l'm'_l\rangle. \end{aligned}\tag{4.5}$$

Puisque la matrice S est diagonale en S_s et que ses éléments ne dépendent pas de M_{S_s}, alors $M'_{S_s} = M_{S_s}$ et

$$\begin{aligned}\langle nlJM_J|S|nlJM'_J\rangle &= \sum_{m_l,m'_l,M_{S_s}} (-1)^{2S_s-2l+M_J+M'_J}(2J+1)\begin{pmatrix} S_s & l & J \\ M_{S_s} & m_l & -M_J\end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} S_s & l & J \\ M_{S_s} & m'_l & -M'_J\end{pmatrix}\langle nlm_l|S|nlm'_l\rangle \end{aligned}\tag{4.6}$$

Les éléments de matrice S entre sous-niveaux de structure fine, $\langle nlJM_J|S|nlJM'_J\rangle$, s'expriment donc par une combinaison linéaire des éléments de matrice $\langle nlm_l|S|nlm'_l\rangle$ calculés avec notre code actuel.

4.4.2 Structure hyperfine

Si l'atome perturbé a un spin nucléaire, il existe alors une structure hyperfine en plus de la structure fine.
Par exemple, dans le cas de l'atome de sodium Na, dont le spin nucléaire $I = 3/2$, l'état fondamental $3s\ ^2S_{1/2}$ a deux niveaux hyperfins possibles: $F = 1$ et $F = 2$. Quant à l'état excité $3p\ ^2P_{3/2}$, il a quatre niveaux hyperfins: $F = 0$, $F = 1$, $F = 2$ et $F = 3$. Les différences d'énergie entre ces niveaux est donnée dans la Table 4.1.

Dans le cas de l'état fondamental du sodium, le calcul donne $\tau\ \Delta E_{HFS} \simeq 5.6 \times 10^{-4} \ll 1$. Pour son état excité $3p\ ^2P_{3/2}$, la plus grande différence est celle entre les états hyperfins $F = 0$ et $F = 3$ où $\Delta E_{HFS} \simeq 1.653 \times 10^{-8}$a.u. (108.72 MHz) (Gangrsky et al. 1998). Pour cette valeur, $\tau\ \Delta E_{HFS} \simeq 3.4 \times 10^{-5} \ll 1$. La structure hyperfine est donc complètement négligeable

dans le traitement des collisions tout le long de ce travail.

Nous écrivons: $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$, $M_F = M_I + M_J$ et

$$|JFM_F\rangle = \sum_{M_I,M_J} \langle IJM_IM_J|FM_F\rangle|JM_J\rangle|IM_I\rangle, \tag{4.7}$$

et nous allons appliquer le même genre de raisonnement que celui que nous avons fait précédemment pour la structure fine. Le spin nucléaire est conservé dans le cas où la structure hyperfine est négligée. Négliger la structure hyperfine revient à écrire que la matrice de diffusion S et la matrice de transition $T = I - S$, sont diagonales en I (le spin nucléaire). Par conséquent, T et S sont indépendantes de M_I. En négligeant la structure hyperfine on peut exprimer les éléments des matrice S et T dans la base $|JFM_F\rangle$ en fonction de ceux dans la base $|JM_J\rangle$, on a pour la matrice S:

$$\langle JFM_F|S|J'F'M'_F\rangle = \sum_{M_I,M_J,M'_J} \langle IJM_IM_J|FM_F\rangle\langle IJ'M_IM'_J|F'M'_F\rangle\langle JM_J|S|J'M'_J\rangle \tag{4.8}$$

Les éléments de structure hyperfine de la matrice S sont des combinaisons linéaires des éléments de matrice de structure fine.

Les deux relations (4.6) et (4.8) sont vérifiées pour chaque paramètre d'impact $\vec{b}$ et pour chaque vitesse relative $\vec{v}$. On utilisera ce résultat par la suite (équation 5.44).

4.5 Potentiel RSU

Puisque nous négligeons l'interaction de structure fine et hyperfine, le potentiel d'interaction est alors uniquement Coulombien. L'interaction d'échange, due au chevauchement entre les fonctions d'onde des deux atomes en collision, est également négligée. On néglige aussi la configuration ionique où les deux électrons de valence appartiennent à l'atome d'hydrogène et où l'atome perturbé est donc complètement ionisé. On considère donc uniquement la liaison covalente où chaque atome conserve son électron. Ces différentes approximations ont été validées par Anstee, Barklem & O'Mara (Anstee 1992; Anstee & O'Mara 1991; Anstee & O'Mara 1995; Anstee et al. 1997; Barklem & O'Mara 1997; Barklem et al. 1998a; Barklem 1998b), on justifiera l'utilisation de ce potentiel dans les prochains chapitres.
Après l'application de la théorie de perturbation de Rayleigh Schrödinger ainsi que l'approximation d'Unsöld (voir section 4.6 et pour les détails voir la section 5.3.4), on obtient ce qu'on appelle le potentiel Rayleigh-Schrödinger-Unsöld (RSU).

L'application de la théorie des perturbations est valable si l'énergie d'interaction entre les deux atomes est suffisamment petite devant l'énergie propre du système constitué des deux atomes "infiniment" éloignés. Une description détaillée de cette théorie est donnée dans les livres de mécanique quantique, dans ce travail on ne rappelle pas cette théorie et on se contentera de l'appliquer. La théorie des perturbations indépendantes du temps est appliquée ici au second ordre.

On utilise ici des fonctions d'onde Coulombiennes avec un défaut quantique $\delta = n - n^*$, où n est le nombre quantique principal et n^* est le nombre quantique effectif (cf prochain paragraphe). n^* est un ingrédient fondamental pour l'application de notre méthode.

L'expression au premier ordre de l'interaction est simple à calculer quand on connaît les fonctions d'ondes du système. Le calcul de l'interaction au second ordre demande une sommation

sur toutes les fonctions d'ondes du système ce qui rend la sommation extrêmement difficile. L'introduction de l'approximation d'Unsöld résoud cette difficulté et rend le calcul possible. Cette approximation est donc essentielle pour l'utilisation de la théorie de perturbation pour déterminer le potentiel d'interaction. Ce potentiel est utilisé durant ce travail et est introduit dans les équations couplées semi-classiques dépendantes du temps afin d'obtenir la matrice de transition (chapitre 5).

4.6 Le nombre quantique effectif

L'atome perturbé est modélisé par un seul électron de valence autour d'un ion effectif à symétrie sphérique. Si l'énergie de l'état $|nl\rangle$ de l'électron de valence est E_{nl} et l'énergie d'ionisation du fondamental de l'atome étudié est E_∞, l'énergie d'ionisation de l'atome dans l'état $|nl\rangle$ (énergie nécessaire pour arracher un électron dans l'état $|nl\rangle$) est $(E_\infty - E_{nl})$. Le nombre quantique effectif est donné par:

$$n^* = [2(E_\infty - E_{nl})]^{-1/2} \times Z_2. \tag{4.9}$$

Z_2=1 si l'atome est neutre, 2 s'il est une fois ionisé, etc.... Z_2 est adopté comme notation pour des raisons qui apparaîtront plus loin.

Dans certains cas rares la configuration parente d'un état atomique est différente de l'état fondamental de l'ion correspondant. C'est à dire, en d'autres termes, qu'après l'arrachement d'un électron (ionisation) à un atome, on obtient un ion qui n'est pas dans son état fondamental mais dans un état excité. Dans ces cas il faut remplaçer E_∞ par $E_\infty + E_{\text{état ionique excité}}$ dans l'expression de n^*, $E_{\text{état ionique excité}}$ est le supplément d'énergie qu'il faut ajouter à E_∞ pour faire passer l'électron de l'état fondamental de l'atome à l'état ionique excité et dans ces cas

$$n^* = [2(E_\infty + E_{\text{état ionique excité}} - E_{nl})]^{-1/2} \times Z_2. \tag{4.10}$$

La détermination correcte de n^* est très importante pour obtenir un bon résultat avec notre méthode. En effet, à n^* correspond une fonction d'onde radiale donnée, une intégration de cette fonction sur la distance entre l'électron de valence et l'ion effectif de l'atome perturbé permet de calculer un potentiel RSU, tel que ceux dont nous avons besoin pour calculer les taux de dépolarisation et les taux de transfert de polarisation avec notre méthode.

On donnera plus loin (chapitres 7, 8 et 9) des exemples de calcul de n^* pour déterminer des taux de dépolarisation et de transfert de polarisation.

4.7 La théorie ABO, historique

La théorie ABO est l'aboutissement des travaux commencés dans les années 70 par Brueckner et O'Mara. Brueckner (1971) a déterminé l'énergie d'interaction entre un atome d'hydrogène et un autre atome perturbé, en utilisant la théorie des perturbations indépendantes du temps au second ordre. Pour rendre le calcul possible, Brueckner a introduit[1] l'approximation d'Unsöld

[1]Bien que Eisenschitz & London (1930) aient déjà utilisé l'approximation d'Unsöld pour les interactions entre les atomes neutres d'hydrogène, Brueckner était le premier a avoir utilisé cette approximation pour les élargissements des raies spectrales atomiques par collisions avec l'hydrogène neutre.

(1927, 1955) qui consiste à remplacer le dénominateur de la contribution au second ordre par une énergie moyenne (plus de détails dans la section 5.3.4). Ensuite, il a utilisé l'approximation de Lindholm-Foley (1942) en moyennant sur toutes les orientations de l'atome perturbé, ce qui correspond a une moyenne sur m_l, et de plus il a négligé la contribution de la perturbation au premier ordre.

En se basant sur les idées ci-dessus, Brueckner a obtenu un potentiel modélisant l'interaction entre l'atome d'hydrogène et un atome perturbé. L'expression du développement analytique de ce potentiel est incomplète et, de plus, les intégrations numériques sur les fonctions d'onde radiales contiennent des erreurs (imprécisions numériques). Brueckner obtenait ainsi les élargissements des raies par collisions isotropes avec les atomes d'hydrogène avec de larges erreurs numériques et analytiques. Brueckner a obtenu les élargissements avec une surestimation d'environ 30 % des élargissement des raies par rapport à un calcul se basant sur les mêmes approximations mais sans erreurs.

O'Mara (1976) a étendu les expressions analytiques obtenues par Brueckner (1971) pour obtenir des expressions plus complètes et il a amélioré le calcul pour obtenir des éléments de matrice d'interaction plus précis que ceux donnés par Brueckner (1971). Malheureusement O'Mara avait fait, à l'époque, l'approximation de Lindholm-Foley, ce qui conduit à une surestimation du potentiel d'interaction et par conséquent une surestimation des élargissements des raies dans les cas où le moment orbital $l \geq 1$. O'Mara avait retenu également l'approximation consistant à négliger l'interaction au premier ordre, c'est à dire il n'a pris en compte que le terme au second ordre de la théorie des perturbations. Ces deux dernières approximations ont été levées par Anstee et O'Mara (1991). L'interaction au premier ordre, qui représente environ 10 % de l'interaction totale, ainsi que la rotation du système durant la collision, sont alors prises en compte.

Anstee & O'Mara (1991) et Anstee (1992) ont alors obtenu ce qu'ils appellent le potentiel RSU pour les états s ($l = 0$) et p ($l = 1$). L'expression de ce potentiel a été ensuite étendue par Barklem et O'Mara (Barklem & O'Mara 1997; Barklem et al. 1998a; Barklem 1998b) aux cas d ($l = 2$) et f ($l = 3$) pour calculer les élargissement des transitions $p - d$ et $d - f$. Une extension aux cas des atomes une fois ionisés a aussi été effectué pour certaines transitions $s - p$ et $p - d$ (Barklem 1998b; Barklem & O'Mara 1998d; Barklem & O'Mara 2000b).

Dans cette thèse, nous avons adapté et appliqué cette théorie de calcul des élargissements des raies au calcul des taux de dépolarisation et de transfert de polarisation dans le cas des atomes et des ions.

Chapitre 5

Traitement d'une collision, mise en place des calculs

5.1 Position du problème

Dans la photosphère et la chromosphère solaires, les collisions isotropes entre les atomes d'hydrogène et un atome rayonnant de la lumière polarisée contribuent à la diminution de la polarisation observée (dépolarisation). En se plaçant dans cadre de l'approximation des impacts, le système à étudier est constitué de l'atome d'hydrogène et d'un atome perturbé. Le mouvement relatif des deux atomes est traité classiquement alors que leurs états internes sont traités quantiquement. Le modèle de collision est représenté sur la Figure 5.1.

5.2 Étude du Hamiltonien du système

Chaque collision est caractérisée par son paramètre d'impact $\vec{b}$ et la vitesse $\vec{v}$ du mouvement relatif. Le système, constitué de l'atome perturbateur d'hydrogène et de l'atome émetteur pertubé, évolue sous l'effet du Hamiltonien total

$$H = H_A + H_P + V. \tag{5.1}$$

H_A, Hamiltonien de l'atome perturbé, est donné par

$$H_A = H_0 + H_{FS} + H_{HFS}. \tag{5.2}$$

H_0 contient la partie électrostatique, H_{FS} et H_{HFS} présentent l'interaction de structure fine et l'interaction de structure hyperfine respectivement. Comme nous l'avons mentionné au chapitre 4, nous négligerons les structures fine et hyperfine. H_P est l'Hamiltonien de l'atome d'hydrogène neutre et V l'énergie d'interaction du système, cette interaction est supposée uniquement électrostatique.

À l'instant t, la distance entre les deux atomes est $R(t)$ (Figure 5.1). L'interaction entre les atomes est modélisée par la Figure 5.1. L'atome perturbé est considéré comme étant constitué d'un électron de valence qui tourne autour d'un coeur chargé à symétrie sphérique. Sur la Figure 5.1, les points 1 et 2 représentent l'électron de l'hydrogène et l'électron de valence de l'atome perturbé respectivement.

Pour le système constitué des deux noyaux et des électrons de valence, deux cas de figure se présentent:

- le premier correspond à un cas où les deux électrons de valence sont attirés par un seul noyau, cela conduit à un état ionique du système.
- le deuxième cas correspond à une configuration où chaque électron reste lié à son noyau, ce cas constitue l'état covalent du système.

L'état ionique est le plus souvent négligeable, Anstee & O'Mara (1991) et Anstee & O'Mara (1995) ont montré que seul l'état covalent est à considérer. Dans ces conditions, le potentiel d'interaction s'écrit, en unités atomiques, qui seront utilisées tout le long de ce travail,

$$V = \frac{Z_1 Z_2}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{Z_1}{r_2} - \frac{Z_2}{p_1}. \tag{5.3}$$

Z_1 est la charge du noyau de l'hydrogène et Z_2 est celle du noyau de l'atome perturbé (ici $Z_1 = Z_2 = 1$). Pour les séparations intermédiaires et à longue distance, l'énergie d'interaction V est très petite devant l'énergie propre du système constitué des deux atomes "infiniment" séparés. L'application[1] de la théorie des perturbations est alors justifiée dans ces séparations. Pour les petites séparations la théorie des perturbations n'est plus valable. Mais nous allons montrer plus loin que ce sont les régions intermédiaires du potentiel d'interaction qui jouent le rôle le plus important dans notre problème de collision, d'où la légitimité de cette approche.

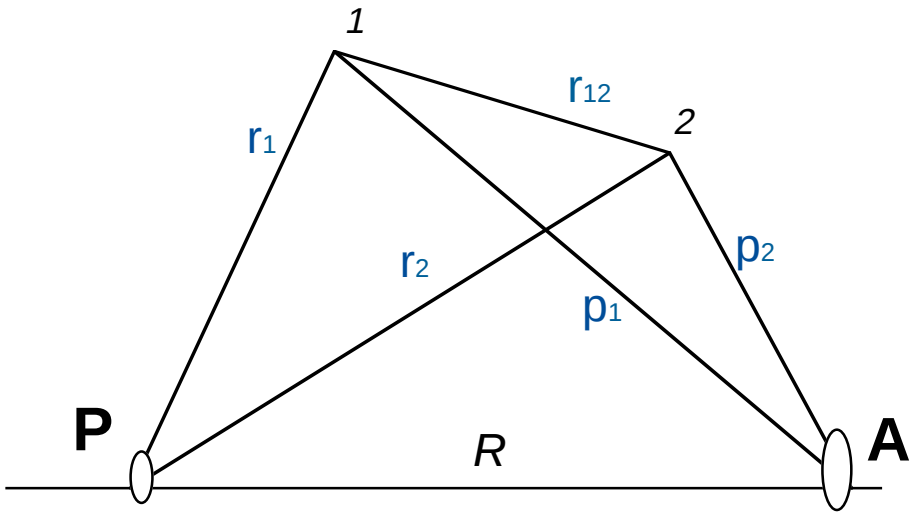

Figure 5.1: Le noyau de l'atome perturbé est localisé en A et le noyau de l'atome d'hydrogène (un proton) en P. Leurs électrons de valence sont notés 1 et 2 respectivement.

5.3 Dynamique de la collision

Pour étudier le problème de collision, deux repères sont possibles. Le repère atomique dans lequel l'axe de quantification est l'axe perpendiculaire au plan de collision et le repère en rotation où l'axe de quantification du moment orbital est l'axe interatomique (Roueff 1974a).

Dans toute la suite, on utilise la notation $|nl\mu_l\rangle$ pour tous les kets exprimés en se référant au repère atomique où l'atome perturbé est fixe à l'origine. Chaque fois que le vecteur d'état du système est exprimé en se référant au repère mobile, on le note $|nlm_l\rangle$.

[1]Comme nous l'avons déjà signalé, la théorie des perturbations est déjà présentée à plusieurs reprises dans des livres spécialisés (Voir, par exemple, Landau & Lifshitz 1967 et Goodisman 1973 ...). Nous ne reprenons pas cette théorie ici et nous allons seulement l'appliquer.

5.3.1 Formulation du problème de collision

L'opérateur d'évolution

La structure fine ainsi que la structure hyperfine, si elle existe, sont négligées. L'équation (5.1) devient donc

$$H = H_0 + H_P + V \tag{5.4}$$

L'équation de Schrödinger qui donne l'évolution de la fonction d'onde totale du système, $|\psi(t)\rangle$, dans la représentation de Schrödinger est donnée par:

$$(H_0 + H_P + V)|\psi(t)\rangle = \mathrm{i}\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} \tag{5.5}$$

Par ailleurs, soit H_1 le Hamiltonien de l'ensemble des deux atomes séparés

$$H_1 = H_0 + H_P, \tag{5.6}$$

de fonctions propres ϕ_1 et de valeurs propres E_1,

$$\begin{aligned} H_1\phi_1 &= E_1\phi_1 \quad \text{avec,} \\ \phi_1 &= |\phi_0\rangle|\phi_P\rangle \quad \text{et} \\ E_1 &= E_0 + E_P, \end{aligned} \tag{5.7}$$

où ϕ_0 et ϕ_P sont les fonctions propres de H_0 et H_P respectivement et E_0 et E_P les valeurs propres correspondantes.

L'atome d'hydrogène reste, par hypothèse, dans son état fondamental $1s$ durant la collision et sa fonction d'onde dans une base standard $|nl\mu_l\rangle$ est notée par

$$\phi_P = |100\rangle_{(H)}, \tag{5.8}$$

son énergie est

$$E_P = 0. \tag{5.9}$$

Les fonctions propres de l'atome considéré sont

$$\phi_0 = |nl\mu_l\rangle, \tag{5.10}$$

et donc

$$\phi_1 = |100\rangle_{(H)}|nl\mu_l\rangle \tag{5.11}$$

sont les fonctions d'onde propres du système (hydrogène + atome considéré) dans le repère atomique. Ces fonctions propres forment une base complète orthonormée.

L'équation de Schrödinger, dans le cas où les deux atomes sont "infiniment" séparés ($V = 0$), s'écrit sous la forme:

$$H_1|\phi_1(t)\rangle = \mathrm{i}\frac{d|\phi_1(t)\rangle}{dt}, \tag{5.12}$$

la solution formelle de cette équation est donnée par

$$|\phi_1(t)\rangle = \exp(-\mathrm{i}E_1 t)|\phi_1(0)\rangle. \tag{5.13}$$

Dans la représentation d'interaction, la fonction du système est définie par

$$|\widetilde{\psi}(t)\rangle = \exp(\mathrm{i}H_1 t)|\psi(t)\rangle, \tag{5.14}$$

et le potentiel d'interaction est défini par

$$\widetilde{V}(t) = \exp(\mathrm{i}H_1 t)V(t)\exp(-\mathrm{i}H_1 t) \tag{5.15}$$

L'opérateur d'évolution dans la représentation d'interaction est

$$U(t,t_0) = \exp(\mathrm{i}H_1 t)T(t,t_0)\exp(-\mathrm{i}H_1 t), \tag{5.16}$$

où $T(t,t_0)$ est l'opérateur d'évolution du système en collision dans la représentation de Schrödinger:

$$|\psi(t)\rangle = T(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle. \tag{5.17}$$

Les équations couplées du mouvement et la matrice de diffusion S

Pour alléger les notations, par la suite nous notons par $|M_{\mu_l}\rangle = \phi_1 = |100\rangle_{(H)}|nl\mu_l\rangle$ (équation 5.11) l'état propre du système non perturbé. On suppose que la fonction d'onde du système perturbé est égale à celle où les deux atomes sont bien séparés. Cette fonction d'onde est donc une combinaison linéaire des états propres du système non perturbé,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\mu_l} a_{\mu_l}(t)e^{-\mathrm{i}E^0_{\mu_l}t}|M_{\mu_l}\rangle, \tag{5.18}$$

où $E^0_{\mu_l}$ sont les valeurs propres correspondantes à $|M_{\mu_l}\rangle$; ce sont les énergies du système où les deux atomes sont "infiniment" séparés.

Dans l'équation de Schrödinger (5.5), nous remplaçons $|\psi(t)\rangle$ par son expression donnée par l'équation (5.18), pour obtenir alors le système d'équations différentielles couplées d'ordre 1:

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\frac{\partial a_{\mu_l}(t)}{\partial t} &= \sum_{\mu'_l=-l}^{l} a_{\mu'_l}(t)\langle M_{\mu_l}|V|M_{\mu'_l}\rangle\exp(-\mathrm{i}(E^0_{\mu_l}-E^0_{\mu'_l})t) \\
&= \sum_{\mu'_l=-l}^{l} a_{\mu'_l}(t)\langle M_{\mu_l}|\widetilde{V}|M_{\mu'_l}\rangle
\end{aligned} \tag{5.19}$$

Nous allons montrer que les coefficient a_{μ_l}, inconnues du système des équations couplées, sont reliés à la matrice de diffusion S. Pour cela on écrit d'abord,

$$|\widetilde{\psi}(t)\rangle = U(t,t_0)|\widetilde{\psi}(t_0)\rangle, \tag{5.20}$$

donc

$$\sum_{\mu_l=-l}^{l} a_{\mu_l}(t)|M_{\mu_l}\rangle = U(t,t_0)\sum_{\mu'_l=-l}^{l} a_{\mu'_l}(t_0)|M_{\mu_l}\rangle, \tag{5.21}$$

si on multiplie les deux membres de cette équation par $\langle M_{\mu_k}|$, on obtient

$$\sum_{\mu_l=-l}^{l} a_{\mu_l}(t)\langle M_{\mu_k}|M_{\mu_l}\rangle = \langle M_{\mu_k}|U(t,t_0)\sum_{\mu'_l=-l}^{l} a_{\mu'_l}(t_0)|M_{\mu'_l}\rangle. \tag{5.22}$$

Sachant que $\langle M_{\mu_k}|M_{\mu_l}\rangle = \delta(\mu_k,\mu_l)$ où δ est le symbole de Kronecker, on a alors:

$$a_{\mu_k}(t) = \langle M_{\mu_k}|U(t,t_0)\sum_{\mu'_l=-l}^{l} a_{\mu'_l}(t_0)|M_{\mu'_l}\rangle. \tag{5.23}$$

Si on tient compte des conditions initiales du système:

$$\begin{aligned} a_{\mu'_l} &= 1, \text{ si } |M_{\mu'_l}\rangle = |M_{\mu_i}\rangle \text{ où } |M_{\mu_i}\rangle \text{ est l' état initial du système} \\ a_{\mu'_l} &= 0, \text{ si non} \end{aligned} \tag{5.24}$$

Ceci revient à dire qu'à chaque fois on fixe l'état initial du système $|M_{\mu_i}\rangle$ et on résout les équations couplées pour déterminer

$$a_{\mu_k}(t) = \langle M_{\mu_k}|U(t,t_0)|M_{\mu_i}\rangle. \tag{5.25}$$

A ce stade on peut définir la probabilité de transition $P_{\mu_i,\mu_j}(t,t_0)$, qui est la probabilité de trouver le système dans l'état $|M_{\mu_j}\rangle$ à l'instant t alors qu'à l'instant t_0 il est dans l'état $|M_{\mu_i}\rangle$:

$$\begin{aligned} P_{\mu_i,\mu_j}(t,t_0) &= |\langle M_{\mu_j}|U(t,t_0)\sum_{\mu_k=-l}^{l} a_{\mu_k}(t_0)|M_{\mu_k}\rangle|^2 \text{ avec,} \\ a_{\mu_k}(t_0) &= \delta(\mu_k,\mu_i),, \end{aligned} \tag{5.26}$$

donc

$$\begin{aligned} P_{\mu_i,\mu_j}(t,t_0) &= |\langle M_{\mu_j}|U(t,t_0)|M_{\mu_i}\rangle|^2 \\ &= |a_{\mu_j}(t)|^2. \end{aligned} \tag{5.27}$$

La probabilité totale de transition qui relie l'état du système $|M_{\mu_i}\rangle$ avant collision ($t_0 = -\infty$) à son état $|M_{\mu_j}\rangle$ après collision ($t = +\infty$) est

$$\begin{aligned} P_{\mu_i,\mu_j}(+\infty,-\infty) &= |a_{\mu_j}(+\infty)|^2 \\ &= |\langle M_{\mu_j}|S|M_{\mu_i}\rangle|^2 \\ &= |\langle M_{\mu_j}|U(+\infty,-\infty)|M_{\mu_i}\rangle|^2,\ |M_{\mu_i}\rangle \text{ est l'état intial du système.} \end{aligned} \tag{5.28}$$

Le système (5.19) doit être résolu $(2l+1)$ fois pour obtenir les coefficients $a_{\mu_k}(t)$ dans le sous-espace (nl). La matrice de diffusion S relie l'état initial du système avant collision ($t_0 = -\infty$) et son état après collision ($t = +\infty$). Par conséquent, pour déterminer S il faut intégrer le système (5.19) sur une collision entière c'est à dire entre $t_0 = -\infty$ et $t = +\infty$. La matrice de diffusion est bien entendue déterminée dans le repère atomique.

Pour résoudre le système des équations couplées (5.19), il faut calculer les éléments de la matrice d'interaction. Pour cela on suit la logique suivante:

- le choix d'un repère adéquat en tenant compte des symétries du problème pour faciliter les calculs,
- l'application de la théorie des perturbations de Rayleigh-Schrödinger et l'approximation d'Unsöld pour obtenir un potentiel effectif noté V_{eff} (potentiel RSU).

5.3.2 Choix d'un repère

Pour étudier l'interaction entre l'atome d'hydrogène et l'atome perturbé, deux référentiels sont envisageables (Roueff 1974a):

– le premier est le référentiel atomique dans lequel l'atome perturbé est fixe à l'origine et l'atome perturbateur passe à côté suivant une trajectoire rectiligne. L'axe de quantification Az est perpendiculaire au plan $(\vec{b}, \vec{v})$ de la collision (Figure 5.2). Dans ce premier référentiel la matrice d'interaction n'est pas diagonale. Pour résoudre l'équation (5.19), décrivant le mouvement du système dans ce référentiel atomique, il faut calculer aussi bien des éléments diagonaux $\langle M_{\mu_l}|V|M_{\mu_l}\rangle$ que des éléments non digonaux $\langle M_{\mu_l}|V|M_{\mu'_l}\rangle$ $(\mu_l \neq \mu'_l)$.

– le second est un référentiel en rotation dans lequel l'axe internucléaire (AZ) est lui même l'axe de quantification (Figure 5.2).
Le choix de ce référentiel est très intéressant: en effet, le potentiel d'interaction présente une symétrie cylindrique autour de l'axe internucléaire, il est donc diagonal dans la base tournante (XYZ). De plus, le potentiel d'interaction ne dépend pas du signe de la projection du moment orbital $\vec{l}$, de l'électron de valence de l'atome perturbé sur l'axe internucléaire: $\langle M_l|V|M_l\rangle = \langle -M_l|V|-M_l\rangle$ $(|-M_l\rangle = |100\rangle_{(H)}|nl-m_l\rangle)$.
Ces raisons de symétrie permettent alors d'éliminer les éléments non diagonaux et de réduire le nombre d'éléments de la matrice d'interaction qu'on doit calculer à la moitié des éléments diagonaux. En effet, dans la base atomique on doit calculer $(2l+1)^2$ éléments de la matrice d'interaction alors que dans cette nouvelle base on ne calcule que $(l+1)$ éléments. Dans ce deuxième repère les expressions analytiques des éléments de la matrice d'interaction à déterminer sont plus simples, et leur nombre est réduit; en adoptant ce choix de repère, on gagne en temps de calcul numérique.
Il est donc plus facile de calculer l'interaction dans le repère mobile $(AXYZ)$ que dans le repère atomique $(Axyz)$. Ce choix du repère en rotation était déjà proposé par Roueff (1972, 1974a) et il est souvent appelé "la méthode Roueff".

Le passage du repère atomique au repère mobile est simplement donné par les trois angles d'Euler dont deux sont fixes. Les angles d'Euler sont: $\frac{\pi}{2}, \beta, \frac{\pi}{2}$ (Figure 5.2). Pour prendre en compte l'effet de la rotation, on fait correspondre à chaque ket de la base atomique son transformé par la rotation $(\frac{\pi}{2}, \beta, \frac{\pi}{2})$ en utilisant la matrice de rotation $\mathcal{D}$, dont la théorie est détaillée, par exemple, dans Edmonds (1960) et Messiah (1961).

Les états $|M_l\rangle = |100\rangle_{(H)}|nlm_l\rangle$ sont relatifs au repère en rotation, tandis que $|M_{\mu_l}\rangle = |100\rangle_{(H)}|nl\mu_l\rangle$ est associé au repère atomique[2]. $\Omega(\frac{\pi}{2}, \beta, \frac{\pi}{2})$ est l'angle solide définissant l'orientation du repère en rotation par rapport au repère atomique, nous avons

$$|M_{\mu_l}\rangle = \sum_{m_l} |M_l\rangle \mathcal{D}^{(l)}_{m_l\mu_l}(\frac{\pi}{2}, \beta, \frac{\pi}{2}), \tag{5.29}$$

où

$$\mathcal{D}^{(l)}_{m_l\mu_l} = \langle M_l|\mathcal{D}(\frac{\pi}{2}, \beta, \frac{\pi}{2})|M_{\mu_l}\rangle. \tag{5.30}$$

[2]On rappelle que la projection du nombre quantique orbital du moment angulaire de l'électron de valence de l'atome perturbé, l, est notée m_l dans le repère en rotation et est notée μ_l dans le repère atomique (Axyz).

Les éléments de la matrice de rotation $\mathcal{D}^{(l)}_{m_l\mu_l}$ sont données par (Messiah 1961):

$$\mathcal{D}^{(l)}_{m_l\mu_l}(\beta,\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}m_l\beta} d^{(l)}_{m_l\mu_l}(\frac{\pi}{2})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_l\frac{\pi}{2}} \tag{5.31}$$

avec

$$d^{(l)}_{m_l\mu_l}(\frac{\pi}{2}) = [\frac{(l+m_l)!(l-m_l)!}{(l+\mu_l)!(l-\mu_l)!}]^{\frac{1}{2}}(\frac{(-1)^{l-m_l}}{2^l})\sum_{\sigma}\begin{pmatrix} l+\mu_l \\ l-m_l-\sigma \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l-\mu_l \\ \sigma \end{pmatrix}. \tag{5.32}$$

À l'élément de la matrice d'interaction dans la base atomique, $\langle M_{\mu_l}|\widetilde{V}|M_{\mu'_l}\rangle$, on fait correspondre son transformé dans la base tournante $\langle M_l|\widetilde{V}|M'_l\rangle$ tel que:

$$\langle M_{\mu_l}|\widetilde{V}|M_{\mu'_l}\rangle = \sum_{m_l m'_l} D^{\dagger(l)}_{\mu_l m_l}\langle M_l|\widetilde{V}|M'_l\rangle D^{(l)}_{m'_l\mu'_l} \tag{5.33}$$

L'équation (5.19) devient alors après cette transformation:

$$\mathrm{i}\frac{\partial a_{\mu_l}(t)}{\partial t} = \sum_{\mu'_l=-l}^{l}\sum_{m_l,m'_l=-l}^{l} a_{\mu'_l}(t) D^{\dagger(l)}_{\mu_l m_l}\langle M_l|\widetilde{V}|M'_l\rangle D^{(l)}_{m'_l\mu'_l}. \tag{5.34}$$

Or

$$\langle M_l|\widetilde{V}|M'_l\rangle = \langle M_l|V|M'_l\rangle \exp(-\mathrm{i}(E^0_{M_l} - E^0_{M'_l})t), \tag{5.35}$$

et en plus, comme on l'à déjà mentionné, V est digonale dans la base $\{|M_l\rangle\}$ associée au repère en rotation, alors,

$$\langle M_l|V|M'_l\rangle = \langle M_l|V|M'_l\rangle\ \delta(M_l, M'_l). \tag{5.36}$$

En tenant compte des équations (5.35) et (5.36), dans L'équation (5.34) la sommation sur m'_l se réduit au terme $m'_l = m_l$. L'élément de matrice dans la représentation d'interaction $\langle M_l|\widetilde{V}|M'_l\rangle$ peut donc être remplacé par l'élément diagonal $\langle M_l|V|M_l\rangle$ de la matrice d'interaction dans la représentation de Schrödinger. Finalement l'équation (5.34) devient (Roueff 1974a; Anstee & O'Mara 1991; Anstee 1992; Barklem et al. 1998a; Barklem & O'Mara 1997; Barklem 1998b):

$$\mathrm{i}\frac{\partial a_{\mu_l}(t)}{\partial t} = \sum_{\mu'_l=-l}^{l}\sum_{m_l=-l}^{l} a_{\mu'_l}(t) D^{\dagger(l)}_{\mu_l m_l}\langle M_l|V|M_l\rangle D^{(l)}_{m_l\mu'_l}. \tag{5.37}$$

La matrice de diffusion S est obtenue, dans le repère atomique, en résolvant ces équations couplées semi-classiques (voir ci-dessus, équation 5.28). Pour un état donné, on obtient $(2l+1)$ équations qui donnent après résolution les $(2l+1)^2$ éléments de la matrice de diffusion S.

5.3.3 Potentiel effectif

Application de la théorie des perturbations et approximation d'Unsöld

Le vecteur d'état du système à l'état fondamental, composé de l'atome d'hydrogène et de l'atome perturbé dans leurs états fondamentaux de vecteurs $|a_0\rangle$ et $|b_0\rangle$ respectivement, est

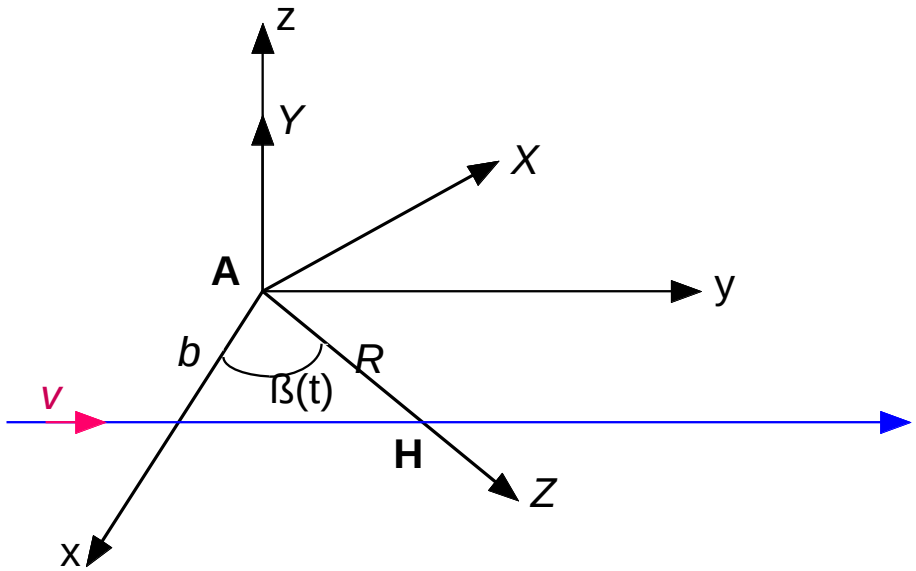

Figure 5.2: La trajectoire du perturbateur (hydrogène) dans les deux référentiels, atomique et en rotation, $Axyz$ et $AXYZ$. R est la distance interatomique, $R = \sqrt{b^2 + v^2t^2}$.

$|a_0b_0\rangle = |a_0\rangle\ |b_0\rangle$. On notera tous les autres états possible du système par $|a_ib_j\rangle$. Dans le cadre de la théorie des perturbations au second ordre, la correction à l'énergie du système, c'est à dire la différence entre son énergie à l'instant $t = -\infty$ et celle à un instant t est:

$$\langle a_0b_0|V|a_0b_0\rangle + \sum_{\substack{i\neq 0 \\ \text{ou/et} \\ j\neq 0}} \frac{\langle a_0b_0|V|a_ib_j\rangle\langle a_ib_j|V|a_0b_0\rangle}{E_a^0 + E_b^0 - E_a^i - E_b^j}, \tag{5.38}$$

L'approximation d'Unsöld, introduite pour la première fois par Unsöld (1927) dans le cas de cacul de l'interaction H-H$^+$, consiste à remplacer $E_a^0 + E_b^0 - E_a^i - E_b^j$ par une énergie moyenne $E_p(R)$. Dans ce cas on est ramené à calculer $E_p(R)$ pour chaque état d'un atome donné et à chaque distance interatomique R. Anstee & O'Mara (1991) ont montré qu'aux distances intermédiaires et aux grandes distances ($R > 10a_0$) la valeur de $E_p(R)$ varie très peu. Anstee & O'Mara (1995) ont aussi montré que les élargissements des raies ne sont pratiquement pas sensibles aux collisions à petites distances (collisions fortes; $R < 10a_0$); Derouich et al. (2003a) ont montré que ceci est aussi le cas pour les calculs concernant la dépolarisation et le transfert de polarisation. L'approximation utilisée dans ce travail suppose que E_p est constante et égale à sa valeur à l'infini $E_p(\infty)$ (Anstee & O'Mara 1991; Anstee 1992).

Il reste maintenant à déterminer la valeur de $E_p(\infty)$. Anstee, O'Mara et Barklem ont adopté la valeur $E_p(\infty) \sim E_a^0 - E_a^i \sim -4/9$ (Anstee 1992; Anstee & O'Mara 1991; Anstee & O'Mara 1995; Anstee et al. 1997; Barklem et al. 1998a; Barklem & O'Mara 1997; Barklem 1998b).

Cette approximation est valable puisque $E_a^0 - E_a^i \gg E_b^0 - E_b^j$ dans le cas des interactions entre l'atome d'hydrogène et des atomes neutres. Les différences d'énergie entre les niveaux excités de l'atome d'hydrogène et son niveau fondamental sont en générale plus grandes que celles des autres atomes neutres (Anstee & O'Mara 1991; Anstee 1992; Barklem et al. 1998a;

Barklem & O'Mara 1997; Barklem 1998b). Par contre, on verra plus loin que cette approximation n'est plus valable dans le cas où on s'intéresse à des interactions entre les atomes neutres d'hydrogène et des ions.

La valeur $E_p = -4/9$ est en accord avec la formule établie par Unsöld (1955) pour les interactions à longue portée entre hydrogène et atomes neutres:

$$-\alpha\frac{< p_2^2 >}{R^6} = \frac{< p_2^2 >}{E_p R^6}, \tag{5.39}$$

$\alpha = 9/2$ est la polarisabilité de l'hydrogène, $< p_2 >$ est le rayon moyen de l'atome perturbé, $C_6 = \alpha < p_2^2 >$ est le coefficient moyen de Van der Waals[3] (C_6 est moyenné sur les sous-niveaux m) et $E_p = -2/\alpha = -4/9$.

Dans le modèle d'interaction (ABO), $< p_2 >$ est la distance moyenne de l'électron de valence par rapport au noyau. Un calcul plus précis de E_p revient donc à un calcul plus précis de C_6 et $< p_2 >$.

Pour le terme $3p\ ^2P$ du sodium[4], un calcul précis de C_6, en utilisant les forces d'oscillateurs données dans (Theodosiou 1989; Wiese et al. 1969), donne une valeur de $C_6 = 163.8$ (Barklem 1998b). De même un calcul précis donne $< p_2 >= 40.48$; ce qui aboutit à $E_p = -2 < p_2 > /C_6 = -0.494$. La valeur approchée $E_p = -4/9 \sim -0.444$ n'est donc pas très différents de la valeur précise $E_p = -0.494$. De plus, nous montrerons plus loin, dans le cas des interactions entre l'hydrogène neutre et des atomes une fois ionisés (chapitre 7), qu'une incertitude de 10 % sur la valeur de E_p n'induit qu'une erreur inférieure à 2 % sur les taux de dépolarisation.

Éléments de matrice du potentiel effectif

Dans le cadre de notre travail, on néglige les transitions entre deux niveaux nl et $n'l'$ différents et on se limite alors seulement au sous-espace nl ($2l+1$ états). La collision étudiée est entre l'atome d'hydrogène dans son état fondamental $|100\rangle_{(H)}$ et un atome perturbé (A) dans l'état $|nlm_l\rangle_{(A)}$. $|M_l\rangle = |100\rangle_{(H)}\ |nlm_l\rangle_{(A)}$ sont les états propres, du système non perturbé, dans le référentiel atomique $(AXYZ)$.

L'application de la théorie des perturbations indépendantes du temps à l'ordre deux donne une valeur E_{M_l}, énergie propre du système atome-hydrogène en collision, telle que:

$$E_{M_l} = E^0_{M_l} + \langle M_l|V|M_l\rangle + \sum_{M'_l \neq M_l} \frac{\langle M_l|V|M'_l\rangle\langle M'_l|V|M_l\rangle}{E^0_{M_l} - E^0_{M'_l}}. \tag{5.40}$$

Au second membre de l'équation (5.40) la sommation, sur toutes les énergies propres et sur l'ensemble complet d'états $\{|M'_l\rangle\}$ des atomes isolés, est pratiquement impossible à calculer. On a introduit l'approximation d'Unsöld (Unsöld 1927; Unsöld 1955) qui consiste à remplacer le dénominateur de la contribution au second ordre par une énergie moyenne E_p. À ce stade, on obtient alors un potentiel d'interaction $\mathrm{V_{eff}}$ qu'on calcule effectivement et qu'on utilise ici et qui est bien sûr légèrement différent de V. Les éléments de la matrice $\mathrm{V_{eff}}$, qui est diagonal, sont:

$$\begin{aligned}\langle M_l|V_{\mathrm{eff}}|M_l\rangle &= E_{M_l} - E^0_{M_l} \\ &= \langle M_l|V|M_l\rangle - \frac{1}{E_p}(\langle M_l|V|M_l\rangle)^2 + \frac{1}{E_p}\langle M_l|V^2|M_l\rangle.\end{aligned} \tag{5.41}$$

[3]Cette expression de C_6 n'est valable que si $E^0_a - E^i_a \gg E^0_b - E^j_b$.

[4]$3p\ ^2P$ se scinde en deux niveaux de structure fine pour donner les niveaux supérieurs $3p\ ^2P_1/2$ et $3p\ ^2P_3/2$ associés aux raies connues $\mathrm{D_1}$ et $\mathrm{D_2}$.

Les éléments de matrice $\langle M_l|V_{\text{eff}}|M_l\rangle$ seront notés V_{eff,m_l}. Ils sont aussi donnés par:

$$\begin{aligned} V_{\text{eff},m_l} &= \langle M_l|V|M_l\rangle - \frac{1}{E_p}(\langle M_l|V|M_l\rangle)^2 \\ &+ \frac{1}{E_p}\int_0^{+\infty} P_{nl}^2 I_{l|m_l|}(R,p_2)dp_2, \end{aligned} \tag{5.42}$$

Dans l'intégrale, $I_{l|m_l|}$ sont des fonctions intégrales très compliquées de R et p_2 dont les expressions, pour l =1, 2 et 3, sont données dans Anstee (1992) et Barklem (1998b). P_{nl} sont les fonctions d'onde radiales sur les quelles on revient en détail dans la prochaine section.

Les termes $\langle M_l|V|M_l\rangle$ et $[\frac{1}{E_p}(\langle M_l|V|M_l\rangle)^2]$ sont relativement simples à calculer (intégration de V sur les fonctions d'onde Coulombiennes). La difficulté est de calculer l'intégrale qui correspond au terme $[\frac{1}{E_p}\langle M_l|V^2|M_l\rangle]$ (équation 5.42), puisqu'il faut intégrer le carré du potentiel V^2 et non pas V.

Dans le référentiel tournant (AXYZ), choisi ici, le potentiel d'interaction ne dépend pas du signe de la projection du moment orbital de l'électron de valence m_l, et donc $V_{\text{eff},m_l} = V_{\text{eff},-m_l}$.

Les fonctions d'onde de l'atome perturbé

La fonction d'onde $|nlm_l\rangle_{(A)}$ de l'atome perturbé est le produit de la fonction radiale P_{nl} et la fonction angulaire Y_{lm_l}:

$$|nlm_l\rangle_{(A)} = \frac{P_{nl}}{p_2}Y_{lm_l}. \tag{5.43}$$

– Y_{lm_l} sont les harmoniques sphériques, leurs expressions sont données dans les livres de mécanique quantique (voir par exemple Cohen-Tannoudji et al. 1973, Complément A_{VI}). Leur calcul est inclu dans celui des fonctions $I_{l|m_l|}$.

– P_{nl} sont les fonctions d'onde radiales Coulombiennes de l'atome perturbé avec un défaut quantique $\delta = n - n^*$. Ces fonctions d'ondes sont des solutions des équations de Schrödinger radiales avec un potentiel Coulombien. Le calcul des fonctions d'ondes radiales n'est pas présenté dans ce mémoire de thèse. Tous les détails concernant ce calcul sont données, par exemple, dans Anstee (1992) et Seaton (1958). Ces fonctions ont l'avantage d'être calculées pour tout état défini par son nombre quantique effectif n^* et son moment cinétique orbital l, quelque soit l'atome ou l'ion perturbé.
Cette proprieté donne le caractère la généralité à notre méthode semi-classique de calculs des taux de dépolarisation et de transfert de polarisation. Ceci n'est pas le cas, par exemple, pour les fonctions d'onde radiales de Thomas-Fermi-Dirac (TFD) qui sont plus précises, car elles tiennent compte des interactions entre les électrons atomiques qui jouent un rôle aux petites distances, et qui sont spécifiques à un atome donné dans un état donné (Warner 1968). Toutefois, l'approximation Coulombienne est valable aux grandes distances du noyau, elle n'est pas valable aux petites distances à cause des interactions entre les électrons de l'atome perturbé. Anstee (1992) et Anstee & O'Mara (1991) ont montré que l'utilisation des fonctions d'ondes (TFD) donne des potentiels dans les régions intermédiaires pratiquement égaux à ceux obtenus en utilisant les fonctions d'onde radiales Coulombiennes. Les fonctions d'ondes (TFD), qui sont plus précises aux petites distances du centre du noyau, n'améliorent pas la précision de nos calculs, et sont relatives à chaque espèce, ce qui nuit au caractère général de notre méthode.

Dans ce travail les potentiels et par conséquent les taux de dépolarisation et les taux de transfert de polarisation sont calculés en utilisant des fonctions d'onde radiales Coulombiennes. C'est un choix qui permet alors d'interpoler ou extrapoler simplement nos résultats si on cherche un résultat qui correspond à un cas précis lié à une observation donnée.

À grande distance du noyau (R très grand), V_{eff,m_l} prend la forme connue $-(C_6)_{nlm_l}/R^6$ du potentiel asypmtotique de Van der Waals (voir Annexe A). Nos résultats seront comparés aux résultats de chimie quantique et aux résultats obtenus dans l'approximation du potentiel de Van der Waals, afin de montrer l'importance des interactions intermédiaires qui sont mal prises en compte dans le potentiel de Van der Waals. Ces interactions intermédiaires sont décrites par le potentiel *ab initio* de chimie quantique et le potentiel RSU utilisé ici.

5.4 Mise en place du calcul des taux de dépolarisation et de transfert de polarisation

Nous avons décrit dans les sections précédentes les étapes nécessaires aboutissant au calcul de la matrice de transition et nous allons mettre dans ce paragraphe en place les calculs.

5.4.1 Taux de dépolarisation

La résolution des équations couplées semi-classiques (5.19) fournit la matrice de diffusion dans la base $|nl\mu_l\rangle$. La structure fine est négligée, la matrice S de diffusion est donc diagonale en S et les éléments de la matrice de diffusion ne dépendent pas de son projection dans le repère atomique (Axyz), μ_S. L'application de l'équation (4.6) donne une relation linéaire entre les éléments de matrice de diffusion dans la base $|nlJ\mu_J\rangle$ et ceux dans la base $|nlm_l\rangle$. $\mu_J = \mu_S + \mu_l$ est la projection du moment angulaire total dans le repère atomique (Axyz). La matrice de transition $T = I - S$ dans la base $|nlJ\mu_J\rangle$ et donc donnée, en fonction de celle dans la base $|nl\mu_l\rangle$, par

$$\begin{aligned}\langle nlJ\mu_J|T|nlJ\mu'_J\rangle &= \sum_{\mu_l,\mu'_l,\mu_S} (-1)^{2S-2l+\mu_J+\mu'_J}(2J+1)\begin{pmatrix} S & l & J \\ \mu_S & \mu_l & -\mu_J \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} S & l & J \\ \mu_S & \mu'_l & -\mu'_J \end{pmatrix} \langle nl\mu_l|T|nl\mu'_l\rangle \end{aligned} \tag{5.44}$$

Nous rappelons que les éléments de matrice de transition $\langle nl\mu_l|T|nl\mu'_l\rangle$ sont obtenus pour un cas particulier où l'axe (Az), perpendiculaire au plan de collision, est l'axe de quantification, de même $\langle nlJ\mu_J|T|nlJ\mu'_J\rangle$ sont alors relatives à cet axe.

Les taux de dépolarisation sont exprimés dans la base des OTI, on effectue le changement de base de la base standard $\{|nlJ\mu_J\rangle\}$ à la base des OTI. De plus, les collisions entre l'atome d'hydrogène et les atomes perturbés sont isotropes et toutes les directions du plan de collisions sont équivalentes. Les probabilités moyennes de dépolarisation exprimées dans la base des OTI, après avoir effectué une moyenne sur toutes les directions, s'écrivent sous la forme (voir Annexe

B pour la démonstration de l'expression ci-dessous):

$$\begin{aligned}\langle P^k(nlJ,b,v)\rangle_{av} &= \frac{1}{2J+1}\sum_{\mu_J,\mu'_J}|\langle nl\ J\ \mu_J|T|nl\ J\ \mu'_J\rangle|^2 \\ &- \sum_{\mu_J,\mu'_J,\nu_J,\nu'_J}\langle nl\ J\ \mu_J|T|nl\ J\ \mu'_J\rangle\langle nl\ J\ \nu_J|T|nl\ J\ \nu'_J\rangle^* \\ &\times\sum_{\chi}(-1)^{2J+k+\mu_J-\mu'_J}\begin{pmatrix} J & J & k \\ -\nu'_J & \mu'_J & \chi\end{pmatrix}\begin{pmatrix} J & J & k \\ \nu_J & -\mu_J & -\chi\end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{5.45}$$

Les règles de sélection des coefficients $3j$ impliquent que la sommation sur χ est réduite à un seul terme puisque $\chi = -(\mu'_J - \nu'_J) = -(\mu_J - \nu_J)$.

La section efficace de dépolarisation est alors calculée à partir de:

$$\sigma^k(nlJ,v) = 2\pi\int_0^\infty \langle P^k(nlJ,b,v)\rangle_{av}\ b\ db \tag{5.46}$$

Aux petits paramètres d'impacts, $\langle P^k(nlJ,b,v)\rangle_{av}$ oscille énormément ce qui rend son intégration numérique difficile. Aussi, il faut garder à l'esprit que nous utilisons un potentiel perturbatif qui devient bien entendu irréaliste[5] dans les régions de petites séparations entre les deux atomes en collision. Ainsi nous introduisons, comme Anstee & O'Mara (1991), un paramètre d'impact critique b_0 et l'équation (5.46) devient:

$$\sigma^k(nlJ,v) \simeq \pi b_0^2 + 2\pi\int_{b_0}^\infty \langle P^k(nlJ,b,v)\rangle_{av}\ b\ db \tag{5.47}$$

L'introduction de ce paramètre d'impact critique n'a pratiquement aucune influence sur le résultat final. En effet, *les sections de dépolarisation ne dépendent pas des collisions à courte portée (collisions fortes)*, elles dépendent surtout des régions intermédiaires[6]. Nous démontrerons ce résultat quantitativement dans les chapitres 6 et 7. Dans ce travail $b_0 = 3\ a_0$, cette valeur sera discuté dans le chapitre 6.

L'obtention des taux de dépolarisation passe par une intégration sur une distribution Maxwellienne de vitesses $f(v)$ pour une température locale T (équation **??**):

$$D^k(nlJ,T) \simeq n_H\int_0^\infty v f(v)dv\left(\pi b_0^2 + 2\pi\int_{b_0}^\infty \langle P^k(nlJ,b,v)\rangle_{av}\ b\ db\right), \tag{5.48}$$

n_H, μ sont la densité d'hydrogène et la masse réduite du système respectivement.

5.4.2 Taux de transfert de polarisation

Comme les probabilités de dépolarisation, les probabilités de transfert de polarisation $\langle P^k(nlJ \to nlJ',b,v)\rangle_{av}$ sont obtenues dans la base des OTI après une moyenne sur toutes les orientations possibles des plans des collisions. L'expression de la probabilité de transfert de

[5] Pour ces petites séparations l'interaction entre les deux atomes devient importante et on ne peut pas la négliger devant l'énergie propre du système: la théorie des perturbations n'est plus valable.

[6] Ce résultat est fondamental et justifie l'utilisation de notre approche semi-classique.

polarisation, en fonction des éléments $\langle nlJ\mu_J|T|nlJ'\mu'_J\rangle$ de la matrice de transition, est donnée par (Annexe B):

$$\begin{aligned}\langle P^k(nlJ \to nlJ', b, v)\rangle_{av} &= \sum_{\mu_J,\mu'_J,\nu_J,\nu'_J} \langle nl\ J\ \mu_J|T|nl\ J'\ \mu'_J\rangle\langle nl\ J\ \nu_J|T|nl\ J'\ \nu'_J\rangle^* \\ &\times \sum_{\chi}(-1)^{J-J'+\mu_J-\mu'_J}\begin{pmatrix} J & J & k \\ \nu_J & -\mu_J & \chi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J' & J' & k \\ \nu'_J & -\mu'_J & \chi \end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{5.49}$$

Les coefficients $3j$ sont non nuls sauf si $\chi = -(\mu'_J - \nu'_J) = -(\mu_J - \nu_J)$ et donc la sommation sur χ est réduite à un seul terme.

On définit les sections efficaces de transfert de polarisation comme:

$$\begin{aligned}\sigma^k(nlJ \to nlJ', v)(J \neq J') &= 2\pi \int_0^\infty \langle P^k(nlJ \to nlJ', b, v)\rangle_{av}\ b\ db \\ &\simeq \pi b_0^2 + 2\pi \int_{b_0}^\infty \langle P^k(nlJ \to nlJ', b, v)\rangle_{av}\ b\ db\end{aligned} \tag{5.50}$$

b_0 est le même que celui adopté dans le cas des section efficace de dépolarisation puisque le problème de collision qui donne naissance à la dépolarisation et au transfert de polarisation est le même.

Les taux de transfert de polarisation $D^k(nlJ \to nlJ', T)$ sont donc calculés selon cette expression:

$$D^k(nlJ \to nlJ', T) = n_H \int_0^\infty v f(v) dv \left(\pi b_0^2 + 2\pi \int_{b_0}^\infty \langle P^k(nlJ \to nlJ', b, v)\rangle_{av}\ b\ db\right) \tag{5.51}$$

5.5 Conclusion

La première étape pour la détermination des taux de dépolarisation et de transfert de polarisation, par notre méthode semi-classique, est le calcul du potentiel d'interaction RSU. Ensuite, la matrice de diffusion est obtenue en résolvant les équations couplées semi-classiques obtenues en écrivant l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Les collisions étant isotropes, nous déterminons la matrice de diffusion, et par la suite la probabilité de transition, pour un plan de collision donné et puis nous moyennons la probabilité de transition sur tous les plan de collisions possibles et nous effectuons un changement de base pour déterminer la probabilité de dépolarisation $P^k(nlJ, b, v)$ (respectivement de transfert de polarisation $P^k(nlJ \to nlJ', b, v)$). La matrice d'interaction est hermitique, la matrice de diffusion S est unitaire et symétrique. L'unitarité et la symétrie de S fournissent des tests pour la résolution numérique des équations couplées et permettent d'évaluer la précision des calculs.

Les intégrations sur les paramètres d'impact et les vitesses donnent les taux de transitions entre sous-niveaux Zeeman et par la suite les taux de dépolarisation et du transfert de polarisation.

Les résultats, des discussions et une application de ces taux feront l'objet des prochains chapitres.

Chapitre 6

Résultats et Discussions (atomes neutres)

6.1 Introduction

Les taux de dépolarisation $D^k(nlJ,\ T)$ et de transfert de polarisation $D^k(nlJ \rightarrow nlJ',\ T)$ sont calculés en utilisant notre méthode semi-classique dans les cas des états p ($l = 1$), d ($l = 2$) et f ($l = 3$). Le calcul passe par les étapes suivantes:

1. Le calcul des fonctions d'ondes Coulombiennes et des potentiels d'interaction semi-classiques.
2. La résolution de l'équation de Schrödinger qui aboutit au calcul de la matrice de transition entre les sous-niveaux Zeeman dans la base ordinaire (équation 3.10).
3. Le calcul des probabilités de transitions dans la base des OTI: ce calcul consiste à effectuer une moyenne angulaire, sur toutes les orientations possibles des plans des collisions, du carré de la matrice de transition exprimée dans la base standard (équations 5.45 et 5.49). Puis, on passe de la base ordinaire à la représentation des OTI.
4. L'intégration sur les paramètres d'impact et les vitesses pour obtenir finalement les différents taux définis au chapitre précédent (équations 5.48 et 5.51).

Ces étapes sont regroupées dans un code interactif.

Nos résultats de calcul, des sections efficaces de dépolarisation et des taux de dépolarisation et aussi des sections efficaces de transfert de polarisation et les taux de transfert de la polarisation, sont présentés ci-après. Ces résultats sont comparés à des résultats de mécanique quantique quand cela est possible. Ils sont aussi comparés à des résultats obtenus en utilisant un potentiel de Van der Waals.

Nous montrons que les sections efficaces de dépolarisation et les sections de transfert de polarisation (et par conséquent, des taux de dépolarisation et des taux de transfert de polarisation), dépendent essentiellement des distances intermédiaires du potentiel d'interaction. Nous effectuons une discussion de nos résultats en vue d'estimer l'erreur par rapport aux résultats de chimie quantique. Nous concluons que notre méthode semi-classique est une alternative raisonnable à l'ancienne méthode de Van der Waals et aussi aux calculs lourds de chimie quantique.

NB: *Trois articles reprenant la présentation de la méthode, son extension et les résultats pour les états p* (Derouich M., Sahal-Bréchot S., Barklem P.S., & O'Mara B.J., 2003, A&A, 404, 763), *d* (Derouich M., Sahal-Bréchot S., Barklem P.S., A&A, 409, 369) *et f* (Derouich M., Sahal-Bréchot S., Barklem P.S., A&A, 414, 373), *sont dans l'annexe C de ce mémoire.*

6.2 Résultats pour les états p des atomes neutres

6.2.1 Cas général des états $^2P_{1/2}$, $^1P_1$ et $^2P_{3/2}$

On considère les collisions dépolarisantes entre les atomes d'hydrogène et des atomes émetteurs. Par hypothèse les atomes d'hydrogène restent dans leur état fondamental $1s$ noté $|00\rangle$ durant la collision. Si les atomes perturbés sont dans un état p ($l = 1$) noté $|1m_l\rangle$, la fonction d'onde du système hydrogène-atome, donnée par l'équation (5.18), est décomposée sur les trois états propres possibles ($-1 \leq m_l \leq 1$) et devient explicitement dans les représentations de Schrödinger et d'interaction,

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= a_1(t)|11\rangle|00\rangle\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, E_1^0\, t} + a_0(t)|10\rangle|00\rangle\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, E_0^0\, t} + a_{-1}(t)|1-1\rangle|00\rangle\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, E_{-1}^0 t} \quad (6.1) \\ |\widetilde{\psi}(t)\rangle &= a_1(t)|11\rangle|00\rangle + a_0(t)|10\rangle|00\rangle + a_{-1}(t)|1-1\rangle|00\rangle. \end{aligned}$$

Le système d'équations couplées (5.19) devient dans ce cas particulier où $l = 1$ (Anstee & O'Mara 1995):

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\frac{\partial a_1(t)}{\partial t} &= a_1(t)V_+ + \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\beta} a_{-1}(t)V_- \\ \mathrm{i}\frac{\partial a_0(t)}{\partial t} &= a_0(t)\langle 1|V_{eff}|1\rangle \qquad (6.2) \\ \mathrm{i}\frac{\partial a_{-1}(t)}{\partial t} &= a_{-1}(t)V_+ + \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\beta} a_1(t)V_- \end{aligned}$$

où:

$$V_\pm = \frac{1}{2}(\langle 1|V_{eff}|1\rangle \pm \langle 0|V_{eff}|0\rangle). \qquad (6.3)$$

La résolution, avec la routine de Runge-Kutta-Merson, de ces équations couplées permet de calculer les probabilités de transition (section 5.3.1). Les sections efficaces sont obtenues après une intégration sur les paramètres d'impact suivi d'une intégration sur les vitesse relatives dont la distribution est Maxwellienne (chapitre 5).

Dans le cas des états $^2P_{1/2}$, $^1P_1$ et $^2P_{3/2}$, les sections efficaces de dépolarisation sont

- $\sigma^1(n1\frac{1}{2})$: destruction de l'orientation de l'état $^2P_{1/2}$
- $\sigma^1(n11)$ et $\sigma^2(n11)$: destruction de l'orientation et de l'alignement, de l'état $^1P_1$, successivement
- $\sigma^1(n1\frac{3}{2})$ et $\sigma^2(n1\frac{3}{2})$: destruction de l'orientation et de l'alignement de l'état $^2P_{3/2}$, reliées à la polarisation circulaire et linéaire successivement; $\sigma^3(n1\frac{3}{2})$: relié indirectement[1] à la polarisation circulaire via les EES.

Nous reportons les résultats obtenus pour ces sections efficaces dans la Table 6.1. Ces sections efficaces sont obtenues par un calcul direct en introduisant dans notre code interactif la valeur de n^* avec $l = 1$. Si pour un cas précis d'astrophysique on a besoin des sections et des taux de dépolarisation pour une raie donnée, on peut tout simplement interpoler dans la Table 6.1 pour la valeur de n^* qui correspond à cette raie (voir la prochaine section, **??**)[2]. Les sections efficaces

[1] On rappelle que le rayonnement ne transporte pas l'ordre tensoriel supérieur à 2, le photon est un boson de spin 1.

[2] Bien sûr on peut toujours aussi faire tourner le code pour la valeur de n^* associée à la raie.

n^*	$\sigma^1(n1\frac{1}{2})$	$\sigma^1(n11)$	$\sigma^2(n11)$	$\sigma^1(n1\frac{3}{2})$	$\sigma^2(n1\frac{3}{2})$	$\sigma^3(n1\frac{3}{2})$	$\sigma^0(n1\frac{1}{2} \rightarrow n1\frac{3}{2})$
1.5	72	203	192	79	141	134	110
1.6	80	233	228	90	165	157	125
1.7	89	276	258	100	187	176	145
1.8	99	323	301	114	217	203	167
1.9	111	377	349	130	252	233	193
2	125	438	405	147	290	268	222
2.1	140	507	466	167	334	307	254
2.2	156	581	533	189	381	349	289
2.3	173	663	605	212	432	393	327
2.4	192	751	683	237	487	442	369
2.5	212	849	769	266	549	496	415
2.6	242	949	869	295	616	562	463
2.7	268	1058	970	327	685	627	514
2.8	292	1180	1075	362	761	691	571
2.9	314	1299	1176	396	835	753	628
3	338	1423	1282	431	911	817	686

Table 6.1: Variation des sections efficaces de dépolarisation et de transfert de polarisation $\sigma^k(n1J)$ et $\sigma^k(n1J \rightarrow n1J')$, pour une une vitesse relative de $10\ \mathrm{km\ s^{-1}}$, en fonction de n^*. Les sections efficaces sont en unités atomiques.

n^*	$\lambda^1(n1\frac{1}{2})$	$\lambda^1(n11)$	$\lambda^2(n11)$	$\lambda^1(n1\frac{3}{2})$	$\lambda^2(n1\frac{3}{2})$	$\lambda^3(n1\frac{3}{2})$	$\lambda^0(n1\frac{1}{2} \rightarrow n1\frac{3}{2})$
1.5	0.173	0.269	0.256	0.201	0.246	0.240	0.234
1.6	0.186	0.270	0.257	0.207	0.246	0.234	0.234
1.7	0.175	0.265	0.247	0.211	0.244	0.235	0.238
1.8	0.183	0.259	0.249	0.213	0.242	0.240	0.236
1.9	0.181	0.256	0.242	0.215	0.240	0.234	0.236
2	0.187	0.251	0.235	0.216	0.237	0.235	0.233
2.1	0.188	0.253	0.237	0.220	0.235	0.218	0.232
2.2	0.199	0.248	0.235	0.219	0.232	0.223	0.229
2.3	0.207	0.246	0.235	0.221	0.231	0.221	0.227
2.4	0.197	0.242	0.231	0.220	0.230	0.225	0.228
2.5	0.178	0.240	0.224	0.221	0.228	0.224	0.231
2.6	0.194	0.242	0.227	0.223	0.228	0.220	0.228
2.7	0.181	0.241	0.223	0.224	0.228	0.226	0.231
2.8	0.191	0.244	0.226	0.228	0.230	0.223	0.232
2.9	0.180	0.249	0.223	0.221	0.230	0.208	0.235
3	0.201	0.243	0.229	0.229	0.2208	0.225	0.234

Table 6.2: exposants de vitesse $\lambda^k(n1J)$ et $\lambda^k(n1J \rightarrow n1J')$ correspondants aux sections efficaces du Table 6.1.

peuvent alors être déterminées pour tous les n^* avec $l = 1$ et ceci est valable pour tous les états dont la sous couche de valence contient un seul électron optique. Pour le cas des états dont la sous couche de valence contient plusieurs électrons optiques, il s'agit d'un travail d'algebre sans complication et qui sera fait après la thèse (voir chapitre: conclusions et perspectives), pour tous les états. Les valeurs des sections efficaces sont données pour une vitesse relative $v = 10$ km s^{-1}. On trouve que la dépendance des sections efficaces avec la vitesse suit la loi:

$$\sigma^k(n1J \to n1J', v)(J = J' \text{ and } J \neq J') \;=\; \sigma^k(n1J \to n1J', v_0)(\frac{v}{v_0})^{-\lambda^k(n1J \to nlJ')}, \quad (6.4)$$

où v_0 est une vitesse où la section efficace est calculée (ici $v_0 = 10$ km s^{-1}). $\lambda^k(nlJ)$ est ce qu'on appelle l'exposant de vitesse et il est donné dans la Table 6.2.

Le code que nous avons développé permet de calculer les sections efficaces pour toutes les vitesses correspondantes aux températures solaires. Mais il est intéressant de mentionner que l'équation (6.4) permet d'obtenir alors les sections efficaces pour toutes les vitesses en utilisant les valeurs données dans les Tables 6.1 et 6.2. Comme on l'a déjà mentionné aux sections (3.4.2 et 3.4.3), les taux de dépolarisation et de transfert de polarisation s'obtiennent par une intégration sur les vitesses (Anstee & O'Mara 1991; Derouich et al. 2003a; Derouich et al. 2003b):

$$\begin{aligned}
D^k(n1J \to n1J',\, T)(J = J' \text{ et } J \neq J')/n_H &\simeq \int_0^\infty v f(v) dv \left(\sigma^k(n1J \to n1J', v_0)(\frac{v}{v_0})^{-\lambda^k(n1J)}\right) \\
&= (\frac{4}{\pi})^{(\frac{1}{2}\lambda^k(n1J \to n1J'))}\Gamma(2 - \frac{1}{2}\lambda^k(n1J \to n1J')) \\
&\times\; v_0\sigma^k(n1J \to n1J', v_0)(\frac{\bar{v}}{v_0})^{1-\lambda^k(n1J \to n1J')} \\
&= (\frac{4}{\pi})^{(\frac{1}{2}\lambda^k(n1J \to n1J'))}\Gamma(2 - \frac{1}{2}\lambda^k(n1J \to n1J')) \\
&\times\; v_0\sigma^k(n1J \to n1J', v_0)(\frac{8k}{\pi\mu v_0})^{1-\lambda^k(n1J \to n1J')} \\
&\times\; T^{\frac{1-\lambda^k(n1J \to n1J')}{2}} \\
&= D^k(n1J \to n1J', T = 5000\text{K})/n_H \\
&\times\; (\frac{T}{5000})^{\frac{1-\lambda^k(n1J \to n1J')}{2}} \qquad (6.5)
\end{aligned}$$

$\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi\mu}}$ est la vitesse moyenne à la température locale T et $f(v)$ est une distribution Maxwellienne de vitesses[3] qui dépend de la masse réduite μ. Nous introduisons plusieurs approximations afin d'avoir une méthode souple donnant des résultats généraux qui peuvent être appliqués au plus grand nombre de cas à condition de ne pas nuire à la qualité de nos résultats.

Les taux de dépolarisation et les taux du transfert de polarisation sont spécifiques à un atome donné via sa masse. Nous avons vérifié qu'on peut introduire l'approximation qui consiste à prendre $\mu = m_H$, où m_H est la masse d'hydrogène. En effet, l'erreur due à cette approximation est inferieure à 4% pour l'atome du sodium Na pour $T \leq 10^4$K. Cette erreur augmente très lentement avec la température et diminue si la masse de l'atome diffuseur augmente. Nous avons donc adopté l'approximation $\mu = m_H$ pour tous les calculs des taux de dépolarisation et de transfert de polarisation. Nous reportons dans le Table 6.3 un résultat général (i.e. ne dépend pas de l'atome) donnant $D^k(n2J \to n2J', T = 5000\text{K})/n_H$ les taux de destruction de l'alignement, par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de n^* et pour la température

[3]Son expression, à la température T, est donnée par (3.21).

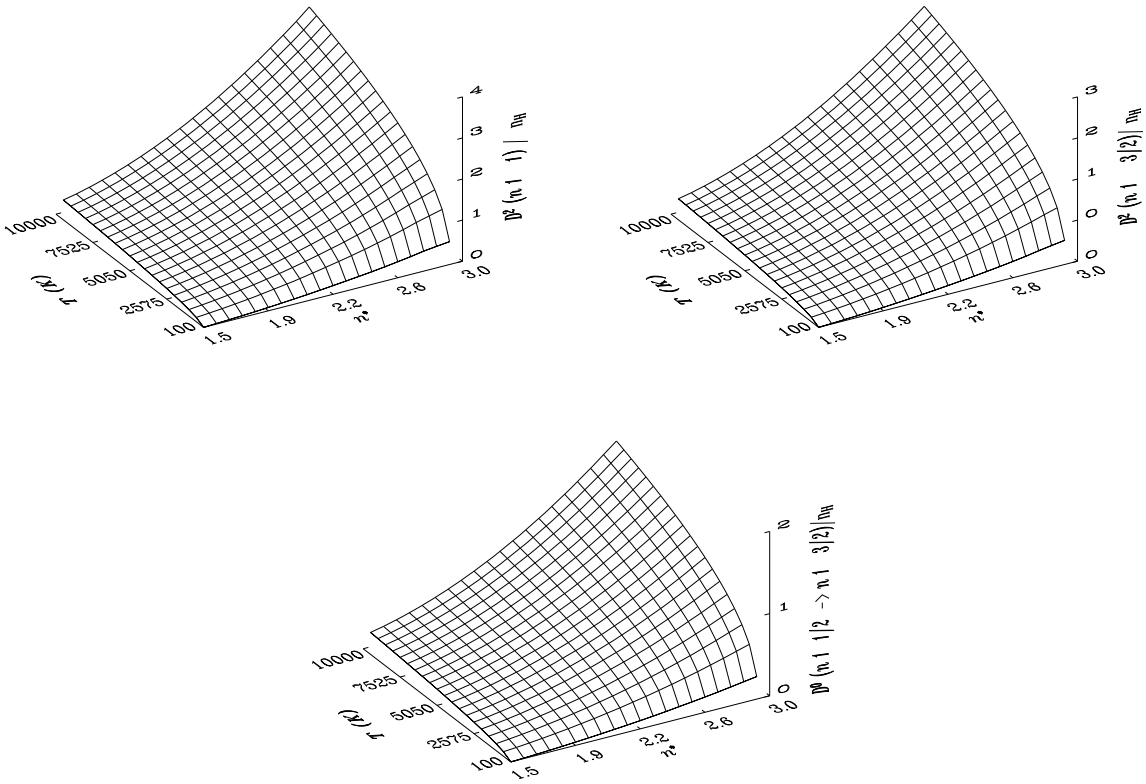

Figure 6.1: En haut à gauche et à droite: taux de destruction de l'alignement (k=2) en fonction de la température T et n^* pour les états p ($l = 1$) où $S = 0$ et $S = \frac{1}{2}$. En bas: taux de transfert de la population (k=0) pour les états p ($l = 1$; $J = \frac{1}{2}$ et $J' = \frac{3}{2}$) en fonction de la température T et n^*. Les taux, par unité de densité des atomes d'hydrogène, sont donnés en 10^{-14} rad. $\mathrm{m}^3\,\mathrm{s}^{-1}$.

n^*	$D^2(n11)$	$D^2(n1\frac{3}{2})$	$D^0(n1\frac{1}{2} \to n1\frac{3}{2})$
1.5	0.5338	0.3931	0.3087
1.6	0.6135	0.4477	0.3508
1.7	0.7188	0.5220	0.4068
1.8	0.8363	0.6047	0.4686
1.9	0.9716	0.7000	0.5415
2.	1.1260	0.8084	0.6230
2.1	1.2971	0.9289	0.7129
2.2	1.4844	1.0599	0.8113
2.3	1.6875	1.2021	0.9181
2.4	1.9043	1.3563	1.0360
2.5	2.1452	1.5270	1.1648
2.6	2.4065	1.7086	1.2999
2.7	2.6814	1.9010	1.4427
2.8	2.9634	2.1015	1.6026
2.9	3.2665	2.3097	1.7622
3.	3.5842	2.5237	1.9251

Table 6.3: Taux de destruction de l'alignement et de transfert de la population, par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de n^* et pour la température locale T=5000K pour les états p $(l = 1)$ où $S = 0$ et $S = \frac{1}{2}$. Les taux sont donnés en 10^{-14} rad. m^3 s^{-1}.

locale T=5000K. Ayant les taux à T=5000K (Table 6.3) et les valeurs de $\lambda^k(n1J \to n1J')$ (Table 6.2) ainsi que l'équation (6.5), on peut avoir le taux de dépolarisation en fonction de la température associée à n'importe quel cas d'application en astrophysique[4]. Sur la Figure 6.1 nous présentons sous forme d'une grille les taux de destruction de l'alignement ($k = 2$) et de transfert de population en fonction de la température T et n^* pour les états p ($l = 1$; $S = 1/2$).

Nous n'avons pas de résultats d'expérience obtenus à des températures solaires pour valider notre approche semi-classique. Nous avons choisi d'appliquer notre méthode générale pour les cas particuliers des atomes du sodium, du calcium, du magnésium et du strontium par ce qu'un traitement récent de chimie quantique existe pour ces atomes. Il est très important de noter que le code informatique associé à notre méthode est général et peut être appliqué à tout atome dans l'état p. À titre indicatif nous avons aussi comparé nos résultats avec des résultats obtenus avec l'approximation de Van der Waals.

Nous appliquons donc notre méthode au calcul de la dépolarisation des niveaux MgI $3p\ ^1P_1$, CaI $4p\ \ ^1P_1$, NaI $3p\ ^2P_{3/2}$ et SrI $5p\ ^1P_1$. Les nombres quantiques effectifs n^* sont calculés à partir de l'équation (4.9) et présentés dans la Table 6.4. Les Figures 6.2 et 6.3 représentent les sections efficaces de dépolarisation et les taux de dépolarisation correspondants pour MgI $3p\ ^1P_1$, CaI $4p\ \ ^1P_1$, NaI $3p\ ^2P_{3/2}$ et SrI $5p\ ^1P_1$. Ces résultats sont obtenus par un calcul direct mais nous avons vérifié qu'on obtient pratiquement le même résultat par interpolation.

Nos résultats seront comparés avec des résultats récents de chimie quantique (section 6.5). Une discussion quant à leur précision sera effectuée.

[4]tout cas particulier correspondant n^*, qui ne figure pas dans la Table 6.7, peut être obtenu par simple interpolation ou extrapolation de ces résultats. De même pour les états d et les états f.

niveau (nl)	E_∞ (cm^{-1})	E_{nl} (cm^{-1})	n^*
MgI $3p\ ^1P_1$	35051.264	61669.14	2.030
CaI $4p\ ^1P_1$	23652.304	49305.72	2.077
NaI $3p\ ^2P_{3/2}$	16956.172	41449.65	2.117
SrI $5p\ ^1P_1$	45903.29	21698.50	2.129

Table 6.4: Valeurs de l'énergie d'ionisation E_∞, de l'énergie E_{nl} de l'état $|nl\rangle$ de l'électron de valence et de n^* pour MgI $3p\ ^1P_1$, CaI $4p\ ^1P_1$, NaI $3p\ ^2P_{3/2}$ et SrI $5p\ ^1P_1$.

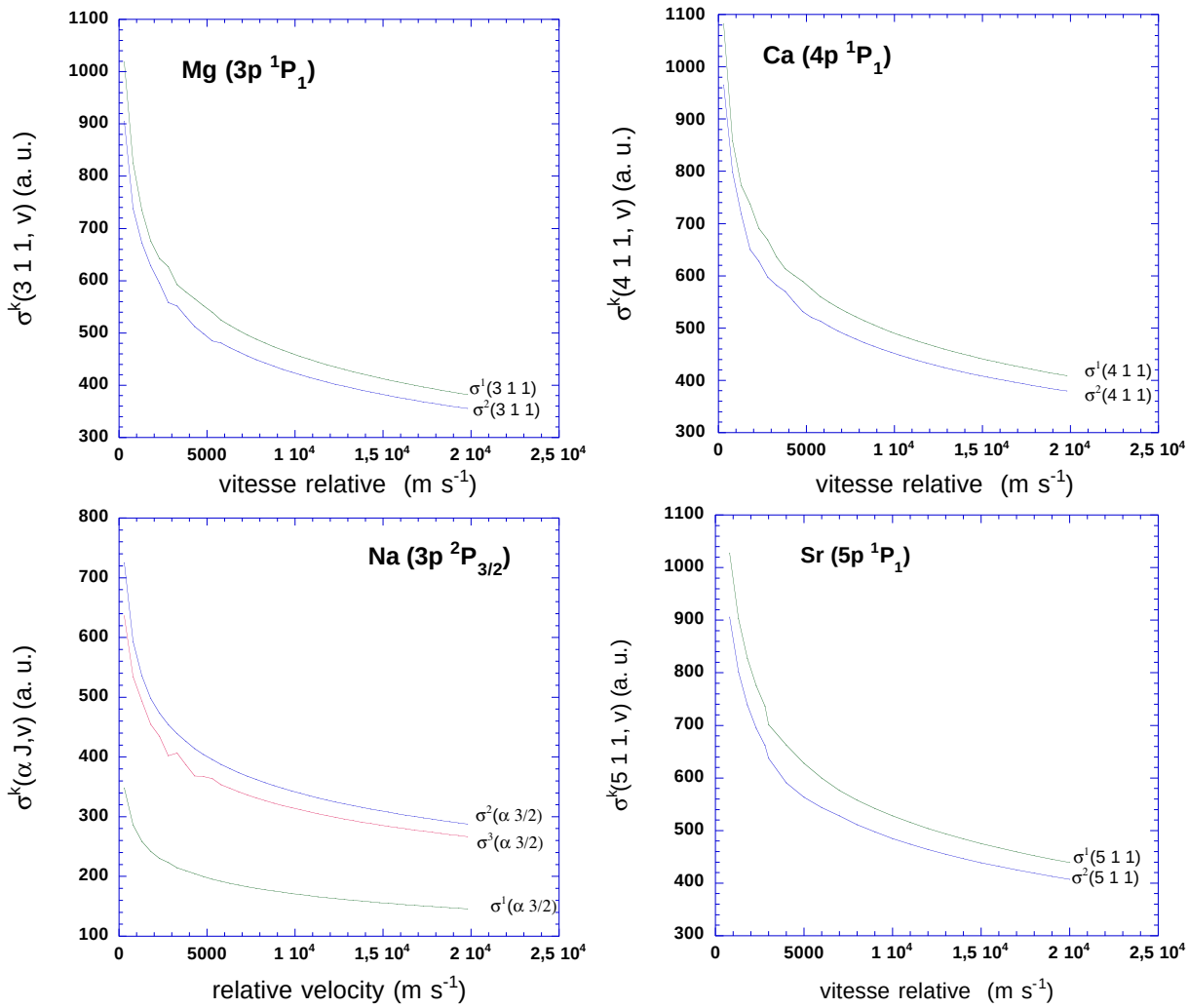

Figure 6.2: Section efficaces de destruction de l'alignement (k=2) en fonction de la vitesse relative.

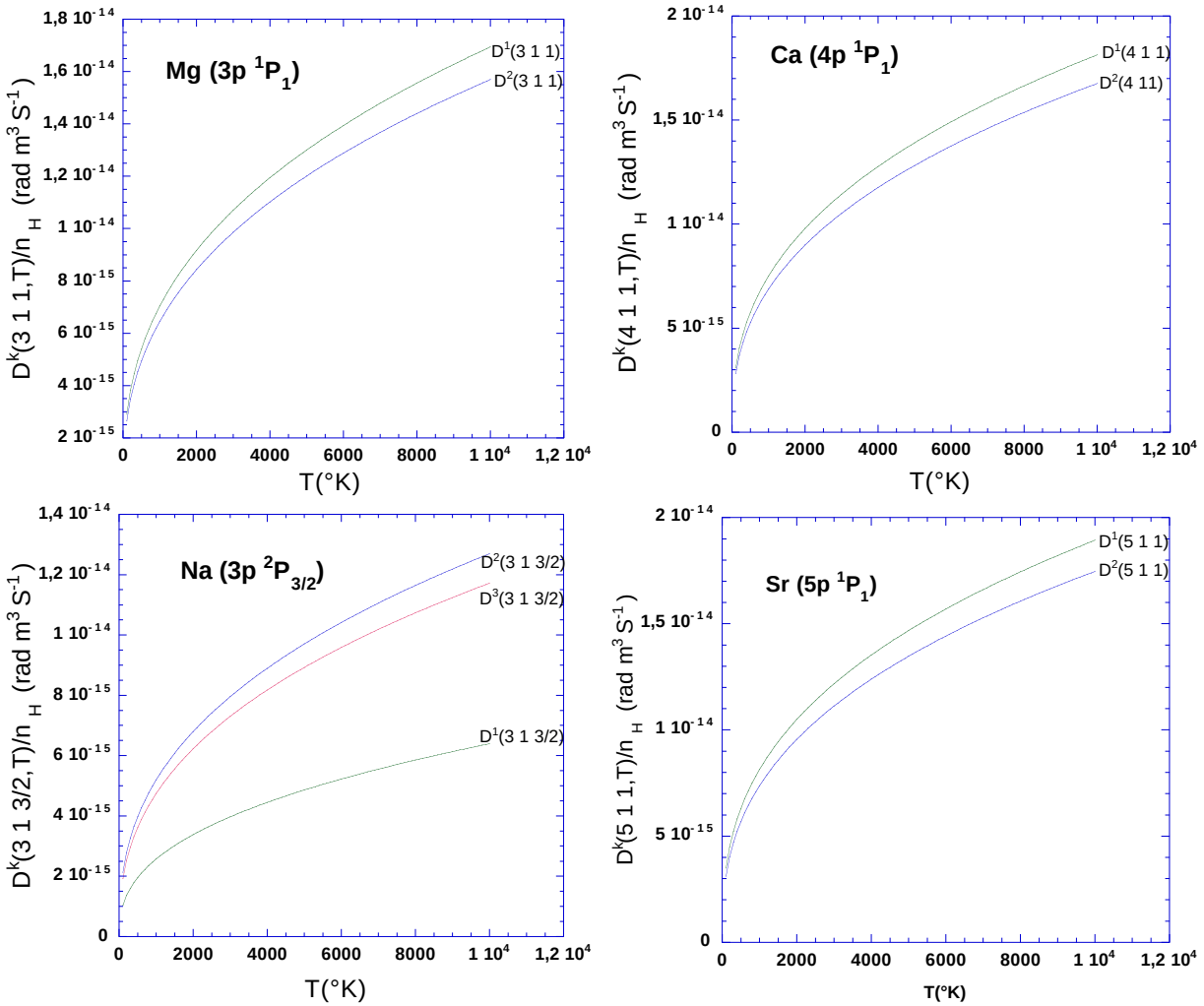

Figure 6.3: Taux de destruction de l'alignement (k=2), par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de la tempérautre T.

6.3 Résultats pour les états d des atomes neutres

Malheureusement, pour le cas des atomes aux états d nous n'avons pas ni des résultats d'expériences ni des résultats de chimie quantique pour comparer. Nous allons donner donc des résultats généraux sans traitement de cas particuliers, tout cas particulier peut être obtenu par simple interpolation ou extrapolation de ces résultats.

6.3.1 Équations couplées

Comme précédemment, on considère un problème de collision entre un atome à l'état d et l'hydrogène neutre qui reste pendant toute la collision dans son état fondamental $1s$. La fonction d'onde du système hydrogène-atome perturbé, donnée par l'équation (5.18), dans le cas général d'un état de nombre quantique l, est décomposé sur les cinq états propres possibles ($-2 \leq m_l \leq 2$). Les équations couplées (5.19) deviennent explicitement (Barklem & O'Mara 1997; Derouich et al. 2003b):

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\frac{\partial a_{-2}(t)}{\partial t} &= \frac{1}{8}a_{-2}(t)(3V_{eff,0}+4V_{eff,1}+V_{eff,2}) \\
&+ \frac{3}{4\sqrt{6}}a_0(t)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\beta}(-V_{eff,0}+V_{eff,2}) \\
&+ \frac{1}{8}a_2(t)\mathrm{e}^{-4\mathrm{i}\beta}(3V_{eff,0}-4V_{eff,1}+V_{eff,2}) \\
\mathrm{i}\frac{\partial a_{-1}(t)}{\partial t} &= \frac{1}{2}a_{-1}(t)(V_{eff,1}+V_{eff,2}) \\
&+ \frac{1}{2}a_1(t)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\beta}(-V_{eff,1}+V_{eff,2}) \\
\mathrm{i}\frac{\partial a_0(t)}{\partial t} &= \frac{3}{4\sqrt{6}}a_{-2}(t)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\beta}(-V_{eff,0}+V_{eff,2}) \\
&+ \frac{3}{4\sqrt{6}}a_2(t)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\beta}(-V_{eff,0}+V_{eff,2}) \\
&+ \frac{1}{4}a_0(t)(V_{eff,0}+3V_{eff,2}) \\
\mathrm{i}\frac{\partial a_1(t)}{\partial t} &= \frac{1}{2}a_{-1}(t)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\beta}(-V_{eff,1}+V_{eff,2}) \\
&+ \frac{1}{2}a_1(t)(V_{eff,1}+V_{eff,2}) \\
\mathrm{i}\frac{\partial a_2(t)}{\partial t} &= \frac{1}{8}a_{-2}(t)\mathrm{e}^{4\mathrm{i}\beta}(3V_{eff,0}-4V_{eff,1}+V_{eff,2}) \\
&+ \frac{3}{4\sqrt{6}}a_0(t)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\beta}(-V_{eff,0}+V_{eff,2}) \\
&+ \frac{1}{8}a_2(t)(3V_{eff,0}+4V_{eff,1}+V_{eff,2})
\end{aligned}
\tag{6.6}
$$

6.3.2 Sections efficaces et taux de dépolarisation et de transfert de polarisation

Comme pour les atomes dans les états p, la variation des sections efficaces de dépolarisation et de transfert polarisation avec la vitesse suit une loi de type $B\ v^{-\lambda}$:

$$\sigma^k(n2J \to n2J', v)(J = J' \text{ et } J \neq J') \;=\; \sigma^k(n2J \to n2J', v_0)(\frac{v}{v_0})^{-\lambda^k(n2J \to n2J')}, \quad (6.7)$$

où v est la vitesse de la particule relative et λ est l'exposant de vitesse. Les valeurs des différentes sections efficaces $\sigma^k(n2J \to n2J', v)(J = J' \text{ et } J \neq J')$ en fonction de n^* pour une vitesse relative $v_0 = 10$ km s^{-1} sont données à la Table 6.5 et les valeurs correspondantes de λ sont présentées dans la Table 6.6. On peut alors calculer les valeurs des sections efficaces pour toutes les vitesses en utilisant l'équation (6.7).

L'intégration sur les vitesses, en supposant que la distribution de vitesses est Maxwellienne, donne les taux de dépolarisation et les taux du transfert polarisation de la forme $A\ T^{(1-\lambda)/2}$:

$$\begin{aligned}
D^k(n2J \to n2J',\ T)(J = J' \text{ and } J \neq J') &= (\frac{4}{\pi})^{(\frac{1}{2}\lambda^k(n2J \to n2J'))}\Gamma(2 - \frac{1}{2}\lambda^k(n2J \to n2J')) \\
&\times\ v_0\sigma^k(n2J \to n2J', v_0)(\frac{\bar{v}}{v_0})^{1-\lambda^k(n2J \to n2J')} \\
&= (\frac{4}{\pi})^{(\frac{1}{2}\lambda^k(n2J \to n2J'))}\Gamma(2 - \frac{1}{2}\lambda^k(n2J \to n2J')) \\
&\times\ v_0\sigma^k(n2J \to n2J', v_0)(\frac{8k}{\pi\mu v_0})^{1-\lambda^k(n2J \to n2J')} \\
&\times\ T^{\frac{1-\lambda^k(n2J \to n2J')}{2}} \\
&= D^k(n2J \to n2J', T = 5000\text{K})/n_H \\
&\times\ (\frac{T}{5000})^{\frac{1-\lambda^k(n2J \to n2J')}{2}} \qquad (6.8)
\end{aligned}$$

Dans certains cas, pour les taux du transfert de l'alignement, les valeurs de λ ne sont pas reportées par ce que les sections efficaces présentent des oscillations avec les vitesses. Nous essaierons d'expliquer ce point à la fin de ce chapitre (section 6.6).

Nous reportons, dans la Table 6.7, $D^k(n2J \to n2J', T = 5000\text{K})/n_H$ en fonction de n^* et pour la température locale T=5000K. On peut avoir le taux de dépolarisation en fonction de la température associée à n'importe quel n^* donné via l'équation (6.8).

Il faut toutefois noter que le calcul des sections efficaces est toujours possible par un calcul direct pour chaque vitesse, même si on ne peut pas déterminer λ pour certains valeurs de n^*. Dans ces cas les taux correspondants ne peuvent plus être donnés sous la forme de l'équation (6.8) mais ils seront calculés par une intégration numérique. Les taux de transfert d'alignement pour $n^* = 3.1$ et 3.2 sont représentés sur la Figure 6.6 bien que λ n'existe pas.

La Figure (6.4) montre les taux de destruction de l'alignement ($k = 2$) en fonction de la température T et n^* pour les états d ($l = 2$). Les taux de transfert de population et de transfert d'alignement sont donnés dans les Figures (6.5) et (6.6) respectivements.

Pour des températures $T \leq 10000$ K, les taux de destruction de l'alignement (liés à la polarisation linéaire du rayonnement) sont tels que:

$$\begin{aligned}
D^2(n\ 2\ 3/2,\ T)/n_H &\leq 6 \times 10^{-14}\text{rad. m}^3\text{ s}^{-1}, \\
D^2(n\ 2\ 2,\ T)/n_H &\leq 8 \times 10^{-14}\text{rad. m}^3\text{ s}^{-1}, \qquad (6.9) \\
D^2(n\ 2\ 5/2,\ T)/n_H &\leq 5 \times 10^{-14}\text{rad. m}^3\text{ s}^{-1}.
\end{aligned}$$

n^*	$\sigma^2(n2\frac{3}{2})$	$\sigma^2(n22)$	$\sigma^2(n2\frac{5}{2})$	$\sigma^0(n2\frac{3}{2} \to n2\frac{5}{2})$	$\sigma^2(n2\frac{3}{2} \to n2\frac{5}{2})$
2.5	283	507	342	278	60
2.6	313	566	380	311	65
2.7	351	633	424	351	73
2.8	394	717	477	397	77
2.9	443	808	537	451	87
3	496	900	598	512	104
3.1	553	1008	666	578	116
3.2	628	1109	727	647	139
3.3	711	1210	800	711	163
3.4	812	1348	897	783	179
3.5	905	1470	964	847	190
3.6	1028	1621	1039	920	196
3.7	1108	1763	1106	961	183
3.8	1202	1910	1185	1004	195
3.9	1299	2066	1260	1079	206
4	1294	2191	1367	1117	232

Table 6.5: Variation des sections efficaces de dépolarisation et de transfert de polarisation $\sigma^k(n2J)$ et $\sigma^k(n2J \to n2J')$, pour une une vitesse relative de $10\ \mathrm{km\ s^{-1}}$, en fonction de n^*. Les sections efficaces sont en unités atomiques.

n^*	$\lambda^2(n2\frac{3}{2})$	$\lambda^2(n22)$	$\lambda^2(n2\frac{5}{2})$	$\lambda^0(n2\frac{3}{2} \to n2\frac{5}{2})$	$\lambda^2(n2\frac{3}{2} \to n2\frac{5}{2})$
2.5	0.207	0.258	0.268	0.259	0.172
2.6	0.223	0.260	0.269	0.258	0.184
2.7	0.222	0.253	0.268	0.259	0.233
2.8	0.200	0.253	0.271	0.257	0.209
2.9	0.214	0.261	0.270	0.253	0.177
3	0.210	0.265	0.280	0.249	0.148
3.1	0.185	0.273	0.282	0.245	-
3.2	0.168	0.274	0.284	0.257	-
3.3	0.153	0.255	0.280	0.267	0.194
3.4	0.137	0.253	0.285	0.279	0.238
3.5	0.140	0.258	0.304	0.286	0.306
3.6	0.131	0.247	0.315	0.272	0.394
3.7	0.175	0.257	0.330	0.249	0.446
3.8	0.179	0.250	0.303	0.234	0.479
3.9	0.208	0.283	0.322	0.237	0.399
4	0.172	0.262	0.296	0.226	0.448

Table 6.6: Exposants de vitesse $\lambda^k(n2J)$ et $\lambda^k(n2J \to n2J')$ correspondants aux sections efficaces du Table 6.5.

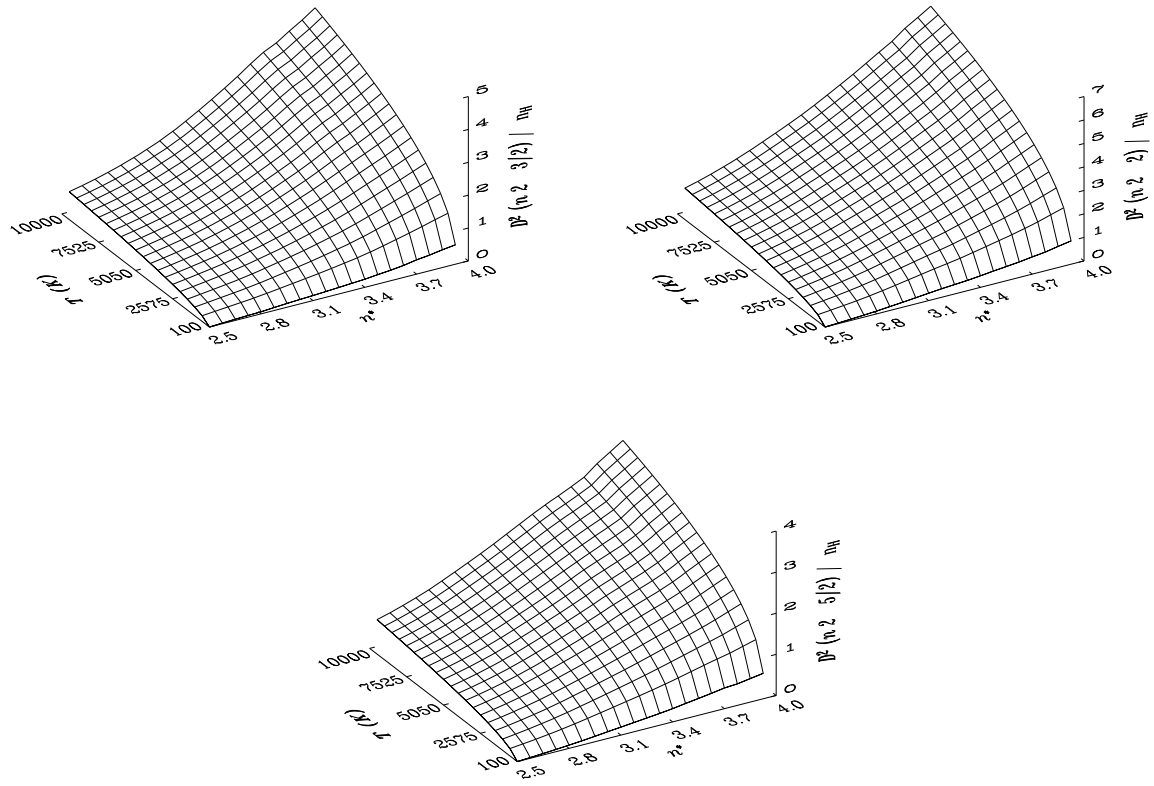

Figure 6.4: Taux de destruction de l'alignement (k=2), par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de la température T et n^* pour les états d ($l = 2$). En haut et à gauche: $S = \frac{1}{2}$ et $J = \frac{3}{2}$; en haut et à droite: $S = 0$ et $J = 2$; en bas: $S = \frac{1}{2}$ et $J = \frac{5}{2}$. Les taux de destruction de l'alignement sont donnés en 10^{-14} rad. m^3 s^{-1}.

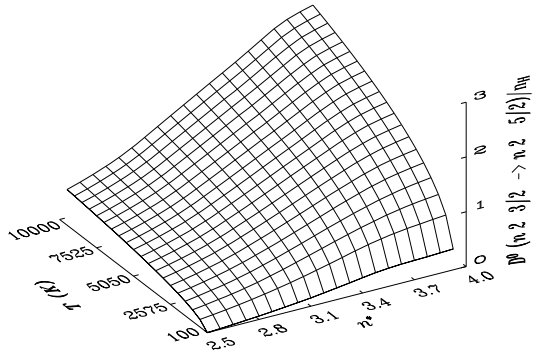

Figure 6.5: Taux de transfert de la population (k=0) pour les états d ($l = 2$; $S = \frac{1}{2}$, $J = \frac{3}{2}$ et $J' = \frac{5}{2}$), par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de la température T et n^*. Ces taux sont donnés en 10^{-14} rad. m^3 s^{-1}.

n^*	$D^2(n2\frac{3}{2})$	$D^2(n22)$	$D^2(n2\frac{5}{2})$	$D^0(n2\frac{3}{2} \rightarrow n2\frac{5}{2})$	$D^2(n2\frac{3}{2} \rightarrow n2\frac{5}{2})$
2.5	0.7886	1.4122	0.9519	0.7756	1.6799
2.6	0.8802	1.5761	1.0571	0.8681	1.8328
2.7	0.9846	1.7736	1.1835	0.9790	1.9977
2.8	1.1011	1.9912	1.3254	1.1063	2.2212
2.9	1.2443	2.2419	1.4889	1.2567	2.5223
3	1.3973	2.5133	1.6661	1.4277	2.8890
3.1	1.5812	2.7941	1.8469	1.6092	3.3904
3.2	1.7843	3.0841	2.0355	1.7883	3.8943
3.3	2.0111	3.3969	2.2358	1.9720	4.3808
3.4	2.2488	3.7382	2.4409	2.1526	4.6750
3.5	2.5114	4.0928	2.6327	2.3330	4.9568
3.6	2.7985	4.4649	2.8160	2.5129	5.4451
3.7	3.0279	4.8444	3.0196	2.6803	5.3765
3.8	3.2977	5.3088	3.3039	2.8081	5.4449
3.9	3.5648	5.6895	3.5467	2.8900	5.7462
4	3.8957	6.1726	3.8318	2.9674	5.7057

Table 6.7: Taux de dépolarisation et de transfert de la polarisation d'ordres pairs, par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de n^* et pour la température locale T=5000K. Les taux sont donnés en 10^{-14} rad. m^3 s^{-1} sauf pour $D^2(n2\frac{3}{2} \rightarrow n2\frac{5}{2})$ qui est donné en 10^{-15} rad. m^3 s^{-1}.

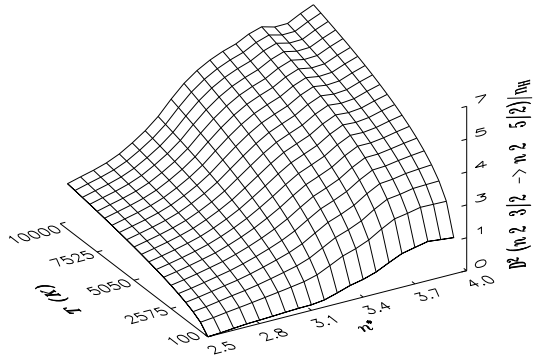

Figure 6.6: Taux de transfert de l'alignement (k=2) pour les états d ($l = 2$; $S = \frac{1}{2}$, $J = \frac{3}{2}$ et $J' = \frac{5}{2}$), par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de la température T et n^*. Ces sont donnés en 10^{-15} rad. m^3 s^{-1}.

Le taux de transfert de population est

$$D^0(n\ 2\ 3/2 \rightarrow n\ 2\ 5/2,\ T)/n_H \leq 4 \times 10^{-14}\ \text{rad. m}^3\ \text{s}^{-1}, \tag{6.10}$$

et le taux de transfert de l'alignement est

$$D^2(n\ 2\ 3/2 \rightarrow n\ 2\ 5/2,\ T)/n_H \leq 8 \times 10^{-15}\ \text{rad. m}^3\ \text{s}^{-1}. \tag{6.11}$$

Ces valeurs numériques sont données pour $n^* \leq 4$ (états d), ce qui permet de couvrir la majorité des raies dont les polarisations observées sont importantes. Mais si un cas où $n^* > 4$ se présente il suffit de faire une extrapolation de nos résultats.

6.4 Résultats pour les états f des atomes neutres

6.4.1 Équations couplées

La fonction d'onde du système hydrogène-atome perturbé, donnée par l'équation (5.18), est décomposée sur les sept états propres possibles ($-3 \leq m_l \leq 3$) et les équations couplées semi-classiques (5.19), obtenues à partir de l'équation de Schrödinger dépendante du temps, décrivant l'évolution en fonction du temps des différents états propres du système, deviennent explicitement (Barklem et al. 1998a):

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\frac{\partial a_{-3}(t)}{\partial t} &= \frac{1}{32}a_{-3}(t)(10V_{eff,0} + 15V_{eff,1} + 6V_{eff,2} + V_{eff,3}) \\
&+ \frac{\sqrt{15}}{32}a_{-1}(t)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\beta}(-2V_{eff,0} - V_{eff,1} + 2V_{eff,2} + V_{eff,3}) \\
&+ \frac{\sqrt{15}}{32}a_{1}(t)\mathrm{e}^{-4\mathrm{i}\beta}(2V_{eff,0} - V_{eff,1} - 2V_{eff,2} + V_{eff,3}) \\
&+ \frac{1}{32}a_{3}(t)\mathrm{e}^{-6\mathrm{i}\beta}(-10V_{eff,0} + 15V_{eff,1} - 6V_{eff,2} + V_{eff,3}) \\
\mathrm{i}\frac{\partial a_{-2}(t)}{\partial t} &= \frac{1}{16}a_{-2}(t)(5V_{eff,1} + 8V_{eff,2} + 3V_{eff,3}) \\
&+ \frac{\sqrt{15}}{8\sqrt{2}}a_{0}(t)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\beta}(-V_{eff,1} + V_{eff,3}) \\
&+ \frac{1}{16}a_{2}(t)\mathrm{e}^{-4\mathrm{i}\beta}(5V_{eff,1} - 8V_{eff,2} + 3V_{eff,3}) \\
\mathrm{i}\frac{\partial a_{-1}(t)}{\partial t} &= \frac{\sqrt{15}}{32}a_{-3}(t)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\beta}(-2V_{eff,0} - V_{eff,1} + 2V_{eff,2} + V_{eff,3}) \\
&+ \frac{1}{32}a_{-1}(t)(6V_{eff,0} + V_{eff,1} + 10V_{eff,2} + 15V_{eff,3}) \\
&+ \frac{1}{32}a_{1}(t)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\beta}(-6V_{eff,0} + V_{eff,1} - 10V_{eff,2} + 15V_{eff,3}) \\
&+ \frac{\sqrt{15}}{32}a_{3}(t)\mathrm{e}^{-4\mathrm{i}\beta}(2V_{eff,0} - V_{eff,1} - 2V_{eff,2} + V_{eff,3}) \\
\mathrm{i}\frac{\partial a_{0}(t)}{\partial t} &= \frac{\sqrt{15}}{8\sqrt{2}}a_{-2}(t)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\beta}(-V_{eff,1} + V_{eff,3})
\end{aligned} \tag{6.12}$$

$$
\begin{aligned}
&+ \frac{1}{8}a_0(t)(3V_{eff,1}+5V_{eff,3}) \\
&+ \frac{\sqrt{15}}{8\sqrt{2}}a_2(t)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\beta}(-V_{eff,1}+V_{eff,3}) \\
\mathrm{i}\frac{\partial a_1(t)}{\partial t} &= \frac{\sqrt{15}}{32}a_{-3}(t)\mathrm{e}^{4\mathrm{i}\beta}(2V_{eff,0}-V_{eff,1}-2V_{eff,2}+V_{eff,3}) \\
&+ \frac{1}{32}a_{-1}(t)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\beta}(-6V_{eff,0}+V_{eff,1}-10V_{eff,2}+15V_{eff,3}) \\
&+ \frac{1}{32}a_1(t)(6V_{eff,0}+V_{eff,1}+10V_{eff,2}+15V_{eff,3}) \\
&+ \frac{\sqrt{15}}{32}a_3(t)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\beta}(-2V_{eff,0}-V_{eff,1}+2V_{eff,2}+V_{eff,3}) \\
\mathrm{i}\frac{\partial a_2(t)}{\partial t} &= \frac{1}{16}a_{-2}(t)\mathrm{e}^{4\mathrm{i}\beta}(5V_{eff,1}-8V_{eff,2}+3V_{eff,3}) \\
&+ \frac{\sqrt{1}5}{8\sqrt{2}}a_0(t)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\beta}(-V_{eff,1}+V_{eff,3}) \\
&+ \frac{1}{16}a_2(t)(5V_{eff,1}+8V_{eff,2}+3V_{eff,3}) \\
\mathrm{i}\frac{\partial a_3(t)}{\partial t} &= \frac{1}{32}a_{-3}(t)\mathrm{e}^{6\mathrm{i}\beta}(-10V_{eff,0}+15V_{eff,1}-6V_{eff,2}+V_{eff,3}) \\
&+ \frac{\sqrt{15}}{32}a_1(t)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\beta}(2V_{eff,0}-V_{eff,1}-2V_{eff,2}+V_{eff,3}) \\
&+ \frac{\sqrt{15}}{32}a_{-1}(t)\mathrm{e}^{4\mathrm{i}\beta}(-2V_{eff,0}-V_{eff,1}+2V_{eff,2}+V_{eff,2}) \\
&+ \frac{1}{32}a_3(t)(10V_{eff,0}+15V_{eff,1}+6V_{eff,2}+V_{eff,3})
\end{aligned}
$$

6.4.2 Sections efficaces et taux de dépolarisation et de transfert de polarisation

Comme pour le cas des états p ($l=1$) et d ($l=2$), les sections efficaces calculées pour les états f ($l=3$) suivent généralement la loi $B\ v^{-\lambda}$:

$$
\sigma^k(n3J \to n3J', v)(J = J' \text{ and } J \neq J') = \sigma^k(n3J \to n3J', v_0)(\frac{v}{v_0})^{-\lambda^k(n3J\to n3J')}, \quad (6.13)
$$

et par conséquent les taux augmentent avec la température en suivant la loi $A\ T^{(1-\lambda)/2}$:

$$
\begin{aligned}
D^k(n3J \to n3J',\ T)(J = J' \text{ and } J \neq J') &= (\frac{4}{\pi})^{(\frac{1}{2}\lambda^k(n3J\to n3J'))}\Gamma(2-\frac{1}{2}\lambda^k(n3J\to n3J')) \\
&\times\ v_0\sigma^k(n3J \to n3J', v_0)(\frac{8k}{\pi\mu v_0})^{1-\lambda^k(n3J\to n3J')} \\
&\times\ T^{\frac{1-\lambda^k(n3J\to n3J')}{2}} \\
&= D^k(n3J \to n3J', T = 5000\mathrm{K})/n_H \\
&\times\ (\frac{T}{5000})^{\frac{1-\lambda^k(n3J\to n3J')}{2}} \qquad (6.14)
\end{aligned}
$$

Les valeurs de λ et σ sont reportées dans les Tables (6.8) et (6.8) respectivements. Comme pour $l=2$, surtout pour le transfert de l'alignement, λ peut ne pas exister: les sections efficaces

présentent de grandes oscillations. Mais, comme on l'a déjà signalé, le calcul des taux correspondants reste possible pour chaque cas. Une proposition d'explication de ce fait est donnée dans le paragraphe (6.6).

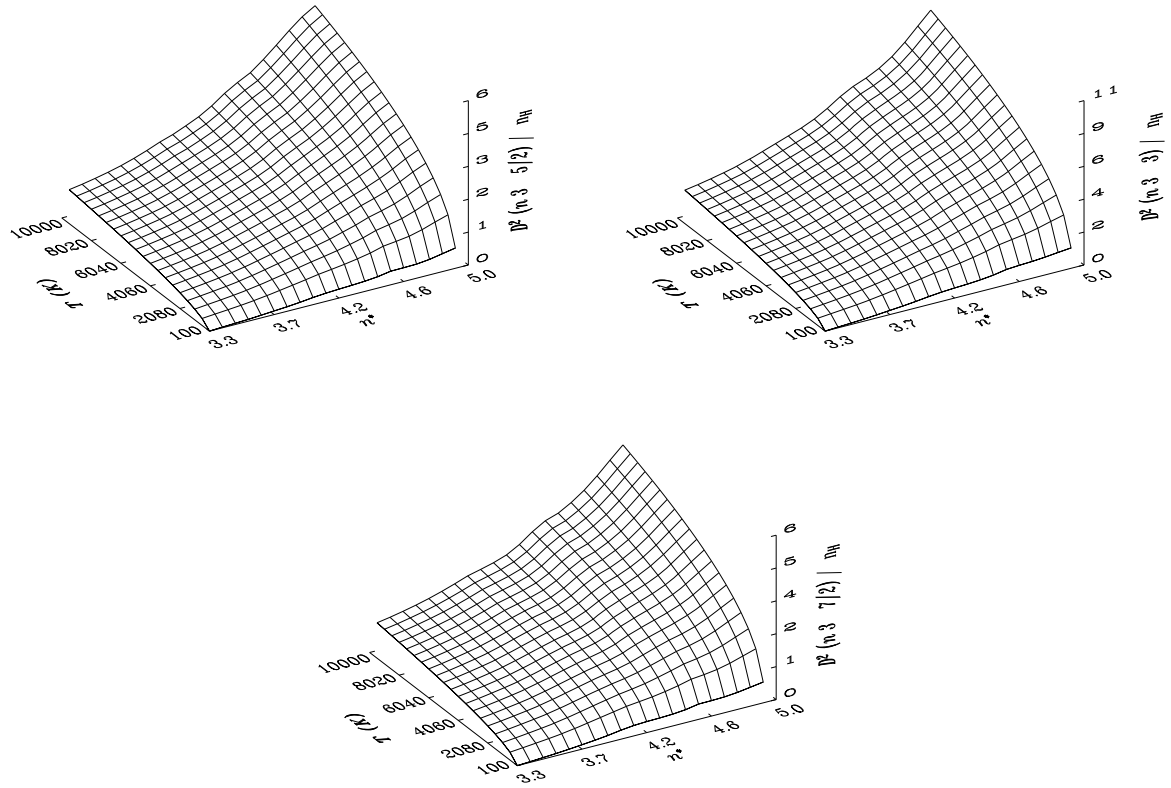

Figure 6.7: Taux de destruction de l'alignement (k=2) pour les états f ($l = 3$), par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de la température T et n^*. En haut et à gauche: $S = \frac{1}{2}$ et $J = \frac{5}{2}$; en haut et à droite: $S = 0$ et $J = 3$; en bas: $S = \frac{1}{2}$ et $J = \frac{7}{2}$. Les taux de destruction de l'alignement sont donnés en 10^{-14} rad. m^3 s^{-1}.

Pour les états f et dans les cas où $J = 7/2$ et $J' = 5/2$, on a le plus souvent:

$$\begin{aligned} D^0(n\ 3\ 7/2 \rightarrow n\ 3\ 5/2,\ T) &> D^1(n\ 3\ 7/2 \rightarrow n\ 3\ 5/2,\ T) > D^2(n\ 3\ 7/2 \rightarrow n\ 3\ 5/2,\ T) \\ &> D^4(n\ 3\ 7/2 \rightarrow n\ 3\ 5/2,\ T) > D^3(n\ 3\ 7/2 \rightarrow n\ 3\ 5/2,\ T) \\ &> D^5(n\ 3\ 7/2 \rightarrow n\ 3\ 5/2,\ T). \end{aligned} \tag{6.15}$$

Les taux de dépolarisation et de transfert de polarisation à 5000K, permettant le calcul de cas taux à toute température, sont présentés dans la .

Ici comme pour les états p et d nous reportons les taux, dans des courbes à trois dimensions, en fonction de n^* et la température ce qui constitue une "base de données sur papier".

La Figure 6.7 montre les taux de destruction de l'alignement ($k = 2$) en fonction de la température locale T et de n^* pour les états f ($l = 3$). Les taux de transfert de population ($k = 0$) et de transfert de l'alignement ($k = 2$) en fonction de T et n^* sont présentés dans les Figures (6.7) et (6.8). Pour une température $T \leq 10000$ K, les taux de destruction de

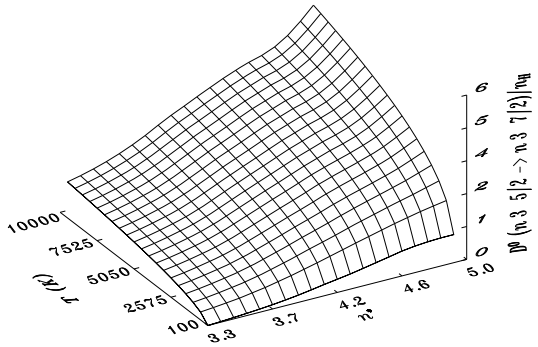

Figure 6.8: Taux de transfert de population (k=0) pour les états f ($l = 3$), par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de la tempérautre T et n^*. $S = \frac{1}{2}$, $J = \frac{5}{2}$ et $J' = \frac{7}{2}$. Le taux de transfert de population est donné en 10^{-14} rad. $\mathrm{m}^3\ \mathrm{s}^{-1}$.

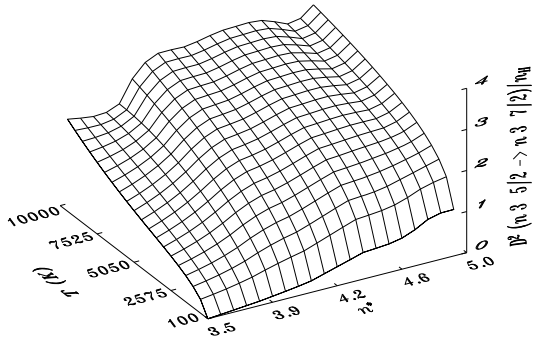

Figure 6.9: Taux de transfert de l'alignement (k=2) pour les états f ($l = 3$), par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de la température T et n^*. $S = \frac{1}{2}$, $J = \frac{5}{2}$ et $J' = \frac{7}{2}$. Les taux de transfert de l'alignement sont donnés en 10^{-15} rad. $\mathrm{m}^3\ \mathrm{s}^{-1}$.

n^*	$\sigma^2(n3\frac{5}{2})$	$\sigma^2(n33)$	$\sigma^2(n3\frac{7}{2})$	$\sigma^0(n3\frac{5}{2} \rightarrow n3\frac{7}{2})$	$\sigma^2(n3\frac{5}{2} \rightarrow n3\frac{7}{2})$
3.3	426	782	491	478	40
3.4	451	831	521	518	44
3.5	489	892	561	565	51
3.6	535	962	603	616	58
3.7	584	1055	654	684	67
3.8	637	1151	708	768	81
3.9	695	1249	765	865	96
4	759	1365	824	962	101
4.1	835	1467	875	1031	110
4.2	890	1572	899	1119	108
4.3	1024	1777	1051	1188	114
4.4	1077	1908	1097	1297	121
4.5	1236	2166	1247	1418	121
4.6	1249	2279	1306	1508	116
4.7	1420	2411	1432	1503	125
4.8	1485	2515	1485	1529	118
4.9	1521	2587	1504	1630	132
5	1928	3135	1845	1786	130

Table 6.8: Variation des sections efficaces de dépolarisation et de transfert de polarisation $\sigma^k(n3J)$ et $\sigma^k(n3J \rightarrow n3J')$, pour une une vitesse relative de $10\ \mathrm{km\ s^{-1}}$, en fonction de n^*. Les sections efficaces sont en unités atomiques.

n^*	$\lambda^2(n3\frac{5}{2})$	$\lambda^2(n33)$	$\lambda^2(n3\frac{7}{2})$	$\lambda^0(n3\frac{5}{2} \rightarrow n3\frac{7}{2})$	$\lambda^2(n3\frac{5}{2} \rightarrow n3\frac{7}{2})$
3.3	0.228	0.277	0.301	0.280	-
3.4	0.249	0.295	0.315	0.283	-
3.5	0.252	0.303	0.325	0.288	-
3.6	0.260	0.311	0.331	0.289	-
3.7	0.275	0.329	0.346	0.289	-
3.8	0.275	0.334	0.354	0.296	-
3.9	0.282	0.342	0.367	0.301	0.103
4	0.306	0.363	0.402	0.320	0.117
4.1	0.298	0.362	0.412	0.344	0.176
4.2	0.278	0.336	0.384	0.351	0.267
4.3	0.240	0.306	0.333	0.370	0.328
4.4	0.235	0.304	0.319	0.394	0.384
4.5	0.262	0.333	0.349	0.415	0.396
4.6	0.215	0.317	0.311	0.440	0.411
4.7	0.181	0.289	0.284	0.435	0.497
4.8	0.192	0.268	0.269	0.409	0.600
4.9	0.218	0.248	0.268	0.363	0.587
5	0.222	0.224	0.242	0.331	0.500

Table 6.9: exposants de vitesse $\lambda^k(n3J)$ et $\lambda^k(n3J \rightarrow n3J')$ correspondant aux sections efficaces de la Table 6.8.

n^*	$D^2(n3\frac{5}{2})$	$D^2(n33)$	$D^2(n3\frac{7}{2})$	$D^0(n3\frac{5}{2} \to n3\frac{7}{2})$	$D^2(n3\frac{5}{2} \to n3\frac{7}{2})$
3.3	1.1858	2.1519	1.3410	1.3389	1.2270
3.4	1.2656	2.2966	1.4251	1.4416	1.4003
3.5	1.3584	2.4626	1.5270	1.5689	1.6173
3.6	1.4610	2.6458	1.6364	1.7199	1.7850
3.7	1.5986	2.8826	1.7773	1.9014	1.9982
3.8	1.7536	3.1471	1.9341	2.1179	2.2852
3.9	1.9352	3.4536	2.1096	2.3703	2.6200
4	2.0952	3.7392	2.2474	2.6180	2.8602
4.1	2.2885	4.0459	2.3827	2.8378	2.9201
4.2	2.4773	4.3937	2.5507	3.0677	2.9941
4.3	2.7819	4.9020	2.8636	3.3058	3.1411
4.4	3.0388	5.3345	3.1341	3.5035	3.2575
4.5	3.2898	5.6959	3.3197	3.7019	3.2843
4.6	3.5900	6.0748	3.5532	3.8572	3.3168
4.7	3.9315	6.5868	3.8599	4.0731	3.2735
4.8	4.3320	7.3168	4.2791	4.4036	3.2136
4.9	4.6477	8.0652	4.7096	4.8098	3.3883
5	4.8537	8.6232	5.0410	5.1680	3.8427

Table 6.10: Taux de dépolarisation et de transfert de la polarisation d'ordres pairs, par unité de densité des atomes d'hydrogène, en fonction de n^* et pour la température locale T=5000K. Les taux sont donnés en 10^{-14} rad. m^3 s^{-1} sauf pour $D^2(n3\frac{5}{2} \to n3\frac{7}{2})$ qui est donné en 10^{-15} rad. m^3 s^{-1}.

l'alignement sont tels que:

$$\begin{aligned} D^2(n\ 3\ 5/2)/n_H &\leq 7 \times 10^{-14} \text{ rad. m}^3 \text{ s}^{-1}, \\ D^2(n\ 3\ 3)/n_H &\leq 12 \times 10^{-14} \text{ rad. m}^3 \text{ s}^{-1} \\ D^2(n\ 3\ 7/2)/n_H &\leq 7 \times 10^{-14} \text{ rad. m}^3 \text{ s}^{-1}. \end{aligned} \tag{6.16}$$

Aussi pour $T \leq 10000$K, le taux de transfert de population

$$D^0(n\ 3\ 5/2 \to n\ 3\ 7/2)/n_H \leq 7 \times 10^{-14} \text{ rad. m}^3 \text{ s}^{-1}, \tag{6.17}$$

et le taux de transfert de l'alignement

$$D^2(n\ 3\ 5/2 \to n\ 3\ 7/2)/n_H \leq 5 \times 10^{-15} \text{ rad. m}^3 \text{ s}^{-1}. \tag{6.18}$$

Ces valeurs numériques sont données pour $n^* \leq 5$ qui doit permettre d'inclure la majorité des raies d'intérêt pour l'étude du second spectre solaire.

6.5 Comparaisons de nos résultats à ceux de la chimie quantique et de Van der Waals et discussion

Nous allons comparer nos résultats avec des résultats récents de chimie quantique (Kerkeni 2002a). *Pour comparer ce qui est comparable, il faut tout d'abord faire correspondre les définitions adoptées dans ce travail et celles adoptées par* Kerkeni (2002a).

Pour Kerkeni (2002a) et Kerkeni et al. (2003), la section de dépolarisation noté $\sigma^k(J)$ est la somme de deux termes: la section efficace de dépolarisation $\Lambda^k(J)$, selon les notations de (Kerkeni 2002a), et la somme des sections efficaces de transfert de structure fine $\sum_{J'\neq J} \sigma(J \rightarrow J')$. Toujours pour Kerkeni (2002a), le taux de dépolarisation noté $g^k(J)$ est obtenu en moyennant, sur les vitesses, la section efficace totale $\Lambda^k(J) + \sum_{J'\neq J} \sigma(J \rightarrow J')$.

L'équivalent quantique de notre taux de dépolarisation $D^k(nlJ)$ qui ne décrit que la dépolarisation du niveau (nlJ) est $\int_0^{+\infty} vf(v)dv\Lambda^k(J)$. Nous comparons donc $D^k(nlJ)/n_H$ et $\int_0^{+\infty} vf(v)dv\Lambda^k(J)$ pour chaque cas. Les taux associés aux sections efficaces $\sigma(J \rightarrow J')$ interviennent dans les EES (Sahal-Bréchot 1977), et peuvent aussi être calculés par notre méthode semi-classique mais ne sont pas discutés ici. Ces taux qui ne dépendent pas de l'ordre k sont donnés par léquation (3.33) qui donne l'expression des taux de transfert de la population $D^0(n\ l\ J \rightarrow n\ l\ J',\ T)$.

6.5.1 Cas de MgI $^1P_1$, de CaI $^1P_1$ et de NaI $^2P_{3/2}$

Sur la Figure 6.10, nous comparons nos taux de destruction de l'alignement pour MgI $3p\ ^1P_1$, CaI $4p\ ^1P_1$, et NaI $3p\ ^2P_{3/2}$ avec ceux calculés dans le cadre de la chimie quantique (Kerkeni 2002a) et ainsi que les taux obtenus avec le potentiel asymptotique de Van der Waals. La différence entre nos calculs et ceux de la chimie quantique est presque la même pour tous les taux (inférieure à 20 %); nous avons vérifié que la plus grande source de différence entre les deux approches provient du calcul du potentiel d'interaction RSU qui est le même pour tous les taux pour un n^* et l donnés (voir chapitre 5). Nous ne montrons que les comparaisons concernant les taux de destruction de l'alignement car ils sont liés directement à la polarisation linéaire et apparaissent dans les EES en étudiant le second spectre solaire. Nous avons constaté que les différences entre les approches semi-classique et de chimie quantique sont pratiquement indépendantes de l'ordre tensoriel k.

On note la nette amélioration apportée par cette méthode à celle de Van der Waals (Figure 6.10) et on remarque que nos résultats sont en bon accord avec ceux de la chimie quantique, ce qui justifie notre approche semi-classique. Le potentiel de Van der Waals sous-estime les taux de dépolarisation.

Nous allons expliquer l'assez bon accord que l'on a obtenu avec Kerkeni (2002a) et aussi la sous-estimation des taux de dépolarisation par la méthode de Van der Waals. Pour cela, nous allons examiner la dépendance en potentiel d'interaction des sections efficaces de dépolarisation et de transfert de polarisation.

Nous avons perturbé localement le potentiel d'interaction pour étudier la sensibilité des sections de dépolarisation à cette perturbation. Nous avons choisi le cas du potentiel d'interaction entre l'atome du calcium et l'hydrogène, bien sûr ce choix est arbitraire mais le résultat de ce test est général.

L'interaction de symétrie-σ $(1s,\ 4p\sigma)$ est plus importante que celle de symétrie-π $(1s,\ 4p\pi)$. Nous avons multiplié alors le potentiel $(1s, 4p\sigma)$ par un facteur de grossissement Gaussien (Anstee & O'Mara 1991):

$$G(R) = 1 + \exp(-(R - R_0)^2), \tag{6.19}$$

R_0 est la position où la perturbation est maximale: le potentiel de symétrie-σ est multiplié par un facteur 2 pour $R = R_0$. La Figure 6.11 montre l'effet de la perturbation du potentiel sur la section efficace de dépolarisation pour trois vitesses relatives différentes. Elle montre que la

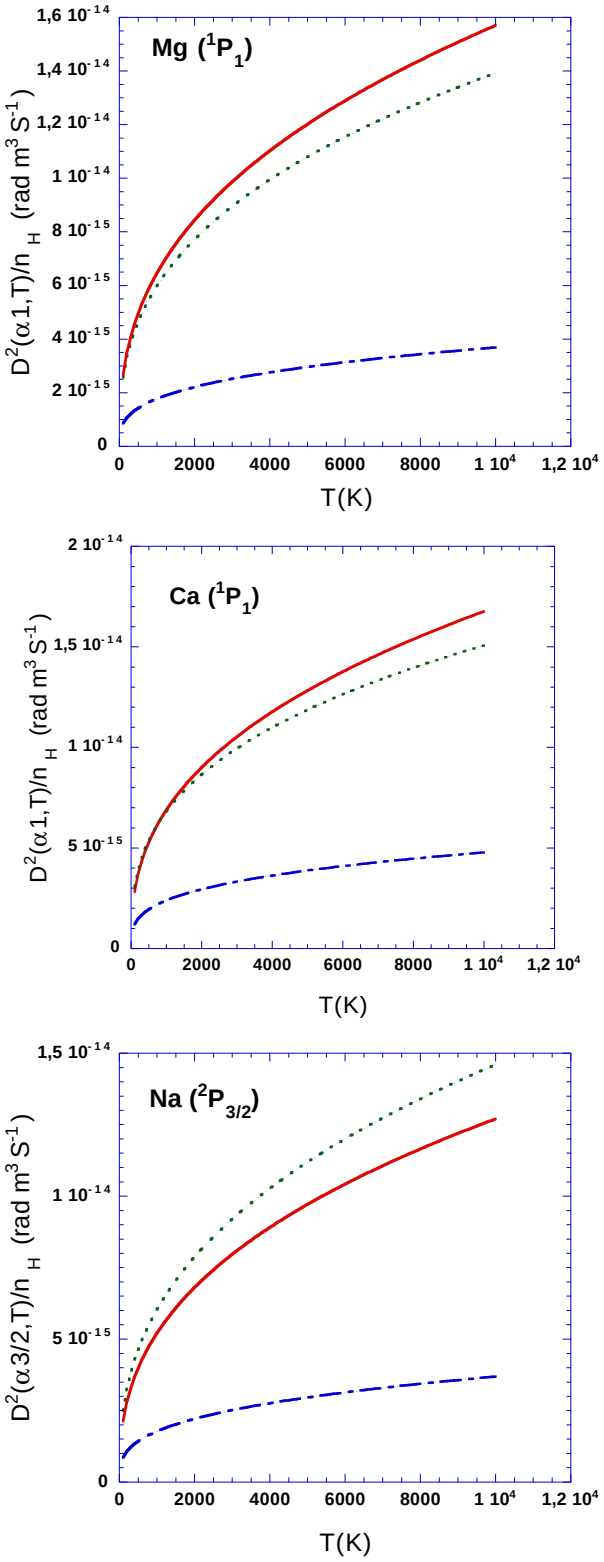

Figure 6.10: Variation en fonction de la température des taux de destruction de l'alignement par unité de densité d'hydrogène. La courbe continue représente nos résultats; la courbe en pointillée représente des résultats de chimie quantique (Kerkeni 2002a); la courbe en points-tirets représente les résultats obtenus avec un potentiel de Van der Waals.

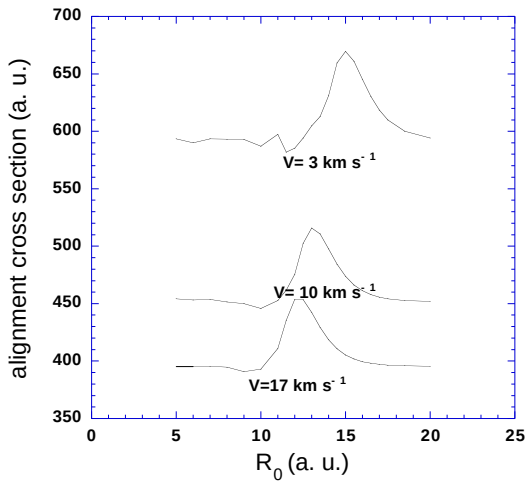

Figure 6.11: Variation des section efficaces de dépolarisation $\sigma^2(411, v)$, de l'état $^1P_1$ du calcium, en fonction d'une perturbation du potentiel d'interaction. Les sections efficaces sont calculées pour les trois vitesses relatives: 3 km s^{-1}, 10 km s^{-1} et 17 km s^{-1}.

section efficace est sensible à la variation du potentiel dans les régions intermédiaires ($10a_0 \leq R_0 \leq 18a_0$). Nous concluons qu'un calcul de section efficace de dépolarisation est d'autant précis que le potentiel est précis dans les régions intermédiaires des distances interatomiques.

L'examen du potentiel RSU, utilisé pour nos calculs, montre qu'à grandes distances il a le comportement habituel de R^{-6} alors que dans les régions intermédiaires il varie en $\sim R^{-10}$. Le potentiel de Van der Waals varie en R^{-6} pour toutes les distances interatomiques R et donc sous-estime la grandeur de l'interaction dans les régions intermédiaires. Les taux de dépolarisation augmentent avec l'augmentation, en valeur absolue, des potentiels d'interaction: c'est pour cette raison que l'utilisation du potentiel de Van der Waals donne des résultats souestimés par un facteur de l'ordre de 2 ou davantage.

Une seconde confirmation quant à l'importance des régions intermédiaires peut être apportée en étudiant la dépendance des sections efficaces de dépolarisation dans les régions à courte portée. Nous avons calculé les valeurs des sections efficaces de dépolarisation du calcium neutre (Ca $^1P_1$) pour différentes valeurs du paramètres d'impact critique b_0 introduit dans l'équation (5.47).

La Figure 6.12 montre l'effet de l'augmentation progressive de b_0 sur la valeur de la section efficace pour deux vitesses relatives $v = 10$ km s^{-1} et $v = 30$ km s^{-1}. Nous remarquons que pour $b_0 \leq 8a_0$ la variation du paramètre d'impact critique n'a aucun effet sur la section efficace. Nous pouvons déduire que la région qui correspond aux collisions fortes (interactions à courte portée) n'a pas d'influence sur les sections efficaces de dépolarisation.

Ce résultat très important justifie le choix d'une approche semi-classique, se basant sur la théorie des perturbations pour le potentiel d'interaction, qui n'est pas valable à petites distances interatomiques. La principale différence entre le potentiel RSU utilisée ici et les calculs *ab initio* de chimie quantique est dans la région de petits paramètres d'impact. Puisque cette région n'a pas pratiquement d'influence sur les sections efficaces, ceci explique le bon accord entre nos résultats et ceux de chimie quantique.

De plus nous notons que la précision de nos résultats est pratiquement la même pour le

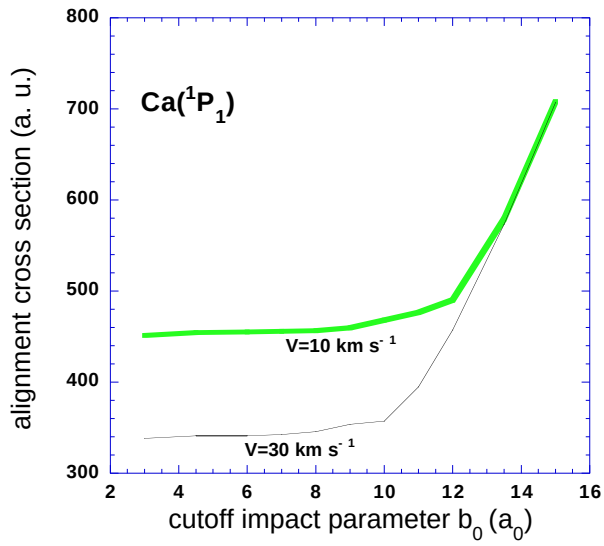

Figure 6.12: Comportement des section efficaces de dépolarisation $\sigma^2(411, v)$, de l'état $^1P_1$ du calcium, en fonction d'une variation de b_0 (équation 5.47). Les sections efficaces sont calculées pour les vitesses relatives: $v = 10$ km s^{-1} et $v = 30$ km s^{-1}.

NaI, pour lequel elle existe une structure fine, que pour le MgI et le CaI qui ne contiennent pas de structure fine. Ceci montre que notre approximation de négliger la structure fine pendant la collision est valable et qu'on s'attend donc à obtenir des résultats en accord avec ceux de la chimie quantique pour le cas de l'ion CaII qui à la même configuration que le NaI (Chapitre 7).

Sur la Figure 6.13 nous comparons le potentiel RSU de symétrie-σ au potentiel *ab initio* de l'état $^2\Sigma$ du Ca (Chambaud & Lévy 1989; Kerkeni 2002a), nous avons multiplié les potentiels par R^6 pour montrer le comportement aux grandes distances. Nous remarquons que dans la région d'intérêt entre $10a_0$ et $18a_0$ le potentiel RSU peut être supérieur ou inférieur au potentiel *ab initio* et en moyenne les deux potentiels ne sont pas très différents ce qui a donné une différence inférieure à 20 % pour les taux de dépolarisation du Ca $^1P_1$ (Figure 6.10).

Finalement, nous remarquons que les différences entre nos résultats avec ceux de la chimie quantique augmentent généralement avec la température. Pour expliquer cela nous suivons le raisonnement suivant:

1. nous avons vérifié que l'intégrant $[v \times f(v)\ \sigma^k(n\ l\ J,\ v)]$ présente un pic qui se décale vers les petites vitesses lorsque la température du milieu diminue
2. comme nous pouvons le constater sur les Figures (6.10) et (6.11), lorsque la vitesse diminue la valeur de R_0, qui positionne la région intermédiaire décisive pour le calcul des taux de dépolarisation, augmente
3. si R_0 augmente, les régions les plus importantes dans le calcul des taux de dépolarisation se décalent vers les régions intermédiaires plus lointaines. Le potentiel RSU dans ces régions devient de plus en plus précis et proche du potentiel *ab initio* de chimie quantique car la théorie des perturbations est d'autant meilleure que les distances interatomiques sont plus grandes.
4. donc, lorsque la température diminue, R_0 augmente et la différence entre les potentiels semi-classique et ceux de chimie quantique diminue: nos taux semi-classique s'approchent

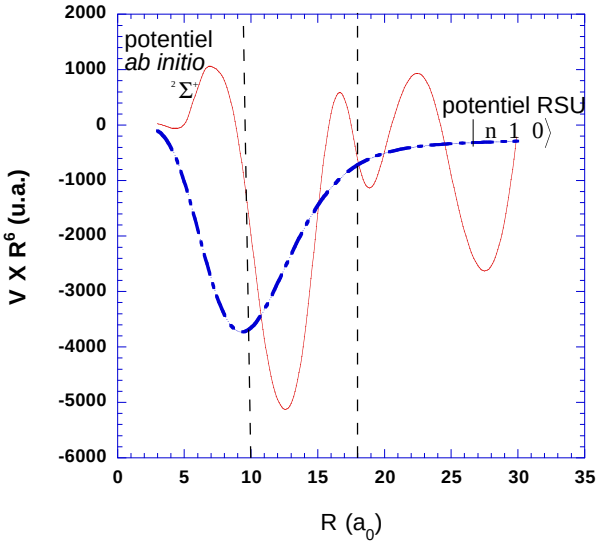

Figure 6.13: Potentiels d'interaction $V(R) \times R^6$ du calcium avec l'hydrogène neutre: la courbe continue représente les calculs *ab initio* (Chambaud & Lévy 1989; Kerkeni 2002a); la courbe en points-tirets représente le potentiel RSU.

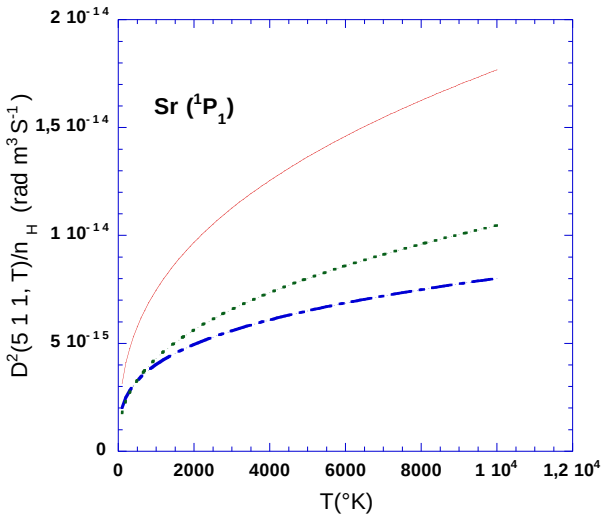

Figure 6.14: Variation des taux de destruction de l'alignement de SrI $^1P_1$, par unité de densité d'hydrogène, $D^2(4\ 1\ 3/2,\ T)/n_H$ en fonction de la température. La courbe continue représente nos résultats; la courbe en pointillée représente des résultats de chimie quantique (Kerkeni 2002a); la courbe en points-tirets représente les résultats obtenus par la méthode de Van der Waals (Deridder et al. 1976).

des taux de chimie quantique.

Le raisonnement analogue peut expliquer l'augmentation de la différence entre nos taux semi-classique et les taux de chimie quantique lorsque la température augmente.

6.5.2 Cas de SrI $^1P_1$

Sur la Figure 6.14, nous reportons:

- les taux de destruction de l'alignement obtenus dans ce travail,
- les taux obtenus également par une méthode de chimie quantique par Kerkeni 2002a,
- les taux de dépolarisation obtenus par la méthode traditionnelle de Van der Waals (Deridder et al. 1976).

Nous remarquons que nos résultats sont plus grands d'environ 50 % que ceux de Kerkeni (2002a) et que, comme précédemment, le potentiel de Van der Waals sous-estime les taux de dépolarisation d'un facteur 2 si on l'a compare à nos résultats; mais nous remarquons que la méthode de Van der Waals donne des résultats en accord avec ceux de Kerkeni (2002a).

Il se trouve que pour la collision entre le strontium et l'hydrogène, la configuration ionique où les deux électrons de valence appartiennent à l'atome d'hydrogène joue un rôle important dans le potentiel d'interaction. Cette configuration rend l'état moléculaire covalent $^2\Sigma$ répulsif et, en particulier, le potentiel présente une bosse à $7a_0$. L'état moléculaire covalent $^2\Sigma$ est corrélé à l'état atomique $|n\ 1\ 0\rangle$. L'effet de la configuration ionique, prise en compte dans le calcul *ab initio* du potentiel, est de diminuer les taux de dépolarisation. Par contre pour des distances supérieures à $15a_0$ l'interaction entre les deux atomes est purement covalente et nous pouvons faire entièrement confiance au potentiel RSU. Autour de cette région, pour le cas du strontium l'application de l'approche quantique rencontre des problèmes. En effet, l'une des approximations essentielle dans les méthodes *ab initio* est l'introduction de la base d'orbitales

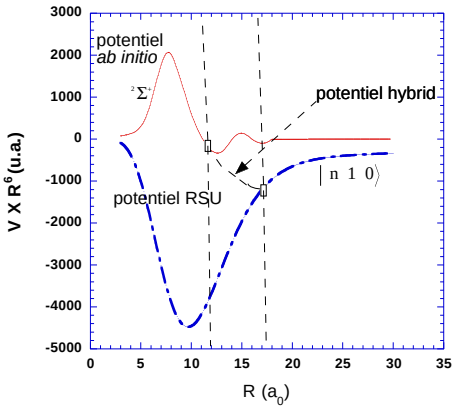

Figure 6.15: Potentiels d'interaction $V(R) \times R^6$ du strontium avec l'hydrogène neutre: la courbe continue représente les calculs *ab initio* (Kerkeni 2002a); la courbe en points-tirets représente le potentiel RSU. Ces deux courbes se rejoignent de manière *ad hoc* pour construire un potentiel hybride.

moléculaires sous forme d'un développement sur un ensemble de fonctions de base atomiques. Dans la pratique, le choix d'une base suffisante est crucial dans un calcul *ab initio*. Plus un atome est lourd, plus il a d'électrons et plus il faut étendre la base. Augmenter la base est très coûteux en temps de calcul. L'insuffisance de la base est particulièrement problématique pour l'atome lourd du strontium à 38 électrons. Aux grandes distances interatomiques, les calculs *ab initio* perdent leur précision à cause des erreurs de superposition de base (BSSE) (Barklem & O'Mara 2001).

Une description semi-classique plus complète de problème de collision doit prendre en compte la compétition entre les deux configurations ioniques et covalentes. Barklem & O'Mara (2001) ont montré, par une étude tout à fait générale mais qui s'applique pour le cas du strontium, qu'à une distance égale à $11a_0$ les énergies propres associées aux deux systèmes Sr^+–H^- et Sr–H sont presque égales ce qui conduit à une perturbation de l'état covalent $|n\ 1\ 0\rangle$ (ce phénomène est connu sous le nom de: "croisement évité"). L'effet de la configuration ionique est importante pour les petites distances et il diminue de plus en plus lorsque la distance d'interaction augmente.

Récemment Kerkeni et al. (2004) ont montré qu'un potentiel "hybride" (Figure 6.15) décrit le mieux possible l'interaction du strontium neutre avec l'hydrogène. Ce potentiel est

- égal au potentiel *ab initio* pour des distances interatomiques inférieures à $R \sim 10a_0$ puisque dans cette région l'approche quantique est sans aucun doute la plus précise
- égal au potentiel semi-classique pour des distances interatomiques supérieures à $R \sim 15a_0$. En effet pour ces distances interatomiques le potentiel semi-classique est plus réaliste
- égal à un potentiel obtenu de manière *ad hoc* entre $R \sim 10a_0$ et $R \sim 15a_0$ par une interpolation spline cubique[5] des deux potentiels *ab initio* et semi-classique.

Nous rappelons que la région intermédiaire entre $10a_0$ et $18a_0$ joue le rôle déterminant pour l'évaluation des taux de dépolarisation (Figures 6.11 et 6.12). Puisque dans la région intermédiaire de $10a_0$ à $15a_0$ le potentiel hybride est en position moyenne par rapport aux potentiels *ab*

[5]Sur la Figure 6.15 nous ne représentons que shématiquement cette interpolation.

initio et semi-classique, nous nous attendons à ce que les taux de dépolarisation hybrides qui sont les plus précis soient placés entre nos taux et ceux de chimie quantique (Kerkeni 2002a).

En conclusion, nous pensons que notre méthode surestime les taux de dépolarisation du strontium de 20 à 30 % car le potentiel RSU ne prend pas en compte la configuration ionique. Cette erreur, spécifique au cas de SrI, est plus importante que l'erreur typique inférieure à 20 % généralement admise dans le cadre de l'application de notre méthode[6]. Nous pensons aussi que les calculs de chimie quantique de Kerkeni (2002a) sont sans doute sous-estimés de 20 à 30 % car le potentiel *ab initio* est insuffisamment précis dans les régions intermédiaires des distances internucléaires à cause du très grand nombre d'électrons. En particulier, il est impossible de trouver une limite asymptotique en $1/R^6$à la courbe du potentiel $^2\Sigma$ (Annie Spielfiedel, communication personnelle). Les taux "hybrides" sont sans doute les plus précis.

Finalement, Nous comptons mener ultérieurement une étude complémentaire de celle de Barklem & O'Mara (2001), effectué pour l'élargissement, qui permettra de prédire la précision attendue de notre méthode en fonction des niveaux atomiques étudiés.

6.6 Tendances générales

Pour un nombre principal effectif donné n^*, et pour les trois cas $l = 1$, $l = 2$, et $l = 3$, les taux de destruction de l'alignement sont telsque $D^2(n\ 3\ 3,\ T) < D^2(n\ 2\ 2,\ T) < D^2(n\ 1\ 1,\ T)$. Par exemple pour $n^* = 3$ et $T = 5000K$,

$$\begin{aligned} D^2(n\ 1\ 1, 5000)/n_H &= 3.6294 \times 10^{-14}\ \text{rad. m}^3\ \text{s}^{-1} \\ D^2(n\ 2\ 2, 5000)/n_H &= 2.5133 \times 10^{-14}\ \text{rad. m}^3\ \text{s}^{-1} \\ D^2(n\ 3\ 3, 5000)/n_H &= 1.6332 \times 10^{-14}\ \text{rad. m}^3\ \text{s}^{-1}. \end{aligned} \tag{6.20}$$

Un résultat simulaire était obtenu pour les élargissements des raies. En effet, Barklem et al. (1998a) ont montré que pour le même n^*, les raies dont le niveau supérieur est p ($l = 1$) sont plus élargies par des collisions isotropes avec des atomes d'hydrogène, que celles dont le niveau supérieur est d ($l = 2$). de même, les raies dont le niveau supérieur est d ($l = 2$) sont plus élargies que celles dont le niveau supérieur est f ($l = 3$). Cet effet a été observé pour la première fois par (Carter 1949) sur le spectre solaire.

En général, si le nombre quantique orbital l augmente les taux de dépolarisation et de transfert de la polarisation diminuent et cela pour la même valeur de l'énergie E_{nl} de l'électron de valence de l'atome perturbé. On rappelle que pour E_{nl} correspond à un nombre principal effectif n^* donné par l'équation (4.9) (voir section 4.6 pour plus de détails sur n^*).

Les taux de dépolarisation sont toujours positifs quelque soit la valeur de l (états p, d et f) et quelque soit l'ordre tensoriel k.

Les taux du transfert de population sont aussi toujours positifs et ils sont du même ordre de grandeur que les taux de dépolarisation. Ces taux sont plus grands que tous les autres taux de transfert d'ordres $k \neq 0$.

Pour les état p ($l = 1$), les taux de transfert de l'orientation sont négatifs. Ce résultat général rejoint la valeur de transfert de l'orientation négatif trouvée dans le cas particulier des raies D du sodium ($J = 1/2 \rightarrow J' = 3/2$) par des calculs de chimie quantique (Kerkeni 2002a). Dans

[6]Comme nous allons le montrer plus loin (section 8.5.2) pour l'analyse du second spectre solaire une erreur d'environ 20 % est tout à fait raisonnable.

le cas où les taux de transfert de l'alignement existent ($2J \geq 2$ et $2J' \geq 2$), ils sont cinq à dix fois plus petits que les taux du transfert de population.

Nous rappelons que $D^k(nlJ \rightarrow nlJ',\ T)$ est une combinaison linéaire des taux collisionnels entre sous-niveaux Zeeman $\zeta(nlJM_J \rightarrow nlJ'M'_J,\ T)$ (équation **??**). Pour le cas des taux de transfert de population, les coefficients de cette combinaison linéaire sont toujours positifs et constants. Les coefficients de la combinaison linéaire dans le cas des taux de transfert de l'orientation peuvent être positifs ou négatifs puisqu'ils ont le même signe que $M_J \times M'_J$ où $-J \leq M_J \leq J$ et $-J' \leq M'_J \leq J'$. Dans le cas des taux de transfert de l'alignement les coefficients de la combinaison linéaire ont le même signe que $(3M_J^2 - J(J+1)) \times (3M_J'^2 - J'(J'+1))$. De même, pour les taux de transfert d'ordre $k > 2$, les coefficients de la combinaison linéaire peuvent être positifs ou négatifs. Dans certains cas on peut avoir des taux de transfert de polarisation négatifs pour une certain intervalle de n^* et de T et positif pour un autre. Bien sûr ces taux augmentent si n^* et T augmentent.

6.7 Conclusion

Notre méthode semi-classique est suffisamment précise aux régions intermédiaires pour remplaçer la méthode asymptotique de Van der Waals. Cette méthode est facile à mettre en œuvre et générale. Le code informatique associé à cette méthode met environ 10 minutes par niveau pour calculer les taux de dépolarisation. Le temps de 10 minutes est relatif à la machine "mesioc"[7] utilisée en interactif. Nous pensons que le temps de calcul doit être pratiquement le même en local en utilisant un ordinateur personnel. De plus, ce code peut tourner en local et nous n'avons pas donc besoin de grandes machines de calculs.

Notre méthode peut être appliquée à un grand nombre de problèmes pour une analyse quantitative des observations de la polarisation linéaire. Les différents taux dépendent, bien entendu, de l'état de l'atome, décrit dans le cadre de notre méthode par n^* et l, et de la température locale du milieu.

Nous pourrons ensuite construire une vraie base de données de taux de dépolarisation et de taux de transfert de polarisation fournissant le taux de dépolarisation à chaque fois qu'on fixe l'état étudié (n^*, l et J) et la température du milieu.

Nous avons pu aussi dégager des conclusions sur les tendances générales des taux de dépolarisation et des taux de transfert de polarisation: ces tendances sont utiles dans le cadre d'une éventuelle extrapolation ou une étude qualitative du second spectre solaire invoquant un grand nombre de taux (Manso Sainz & Landi Degl'Innocenti 2002). Nous donnerons des formules simples décrivant les lois de variation des taux de dépolarisation en fonction de n^*, l et J (en préparation).

Nos résultats concernent le cas des atomes simples ou un seul électron de l'atome perturbé peut sentir l'effet de la collision avec l'hydrogène. Le passage à un cas plus complexe où plusieurs électrons sont présents dans la sous couche de valence (atomes complexes) nécessite un simple calcul d'algèbre angulaire. Nous sommes donc maintenant capable de déterminer tous les taux de dépolarisation associés aux raies du second spectre solaire de l'atome de titane TiI (ce travail fera l'objet d'un prochain article en préparation).

Finalement, au chapitre 8, où nous traitons des observations de la raie SrI 4607 Å , nous donnerons une autre justification de la valeur de l'utilisation de cette méthode générale.

[7] Type: DEC AlphaServer 1000 EV5/400Mhz; Mémoire: 512 Mo.

Chapitre 7

Extension au cas des ions

7.1 Introduction

Nous avons montré au chapitre précédent que notre théorie donne des résultats intéressants et faciles à mettre en œuvre pour le cas des collisions de l'hydrogène avec des atomes neutres pour diverses valeurs du nombre quantique orbital l.

La souplesse et la bonne précision de cette méthode nous ont donné la conviction de l'utilité de son extension pour le cas des collisions isotropes entre l'hydrogène neutre et les ions. Nous montrons dans ce chapitre que cette extension permet d'obtenir une méthode générale calculant avec une précision raisonnable les taux de dépolarisation et les taux de transfert de polarisation pour les ions. Néanmoins, ces taux ne peuvent pas être donnés sous forme de grilles de trois dimensions en fonction de la température locale et du nombre quantique effectif n^* comme était le cas pour les atomes neutres. Pour les ions nous sommes ramenés à déterminer des taux de dépolarisation et des taux de transfert de polarisation pour chaque ion. Cette difficulté résulte du fait que la valeur de E_P, prise égale $-4/9$ pour tous les atomes neutres (cf. chapitre précédent), dépend de chaque ion. Ainsi, notre méthode passe par la détermination de E_P pour chaque ion afin de déterminer le potentiel d'interaction et ensuite résoudre les mêmes équations couplées que celles obtenues pour les collisions entre l'hydrogène et les atomes neutres. Nous obtenons alors la matrice de transition, et après intégration sur les paramètres d'impact et sur les vitesses nous obtenons les taux de dépolarisation et des taux de transfert de polarisation. Nous insistons sur le caractère général de notre méthode et du code informatique qui lui est associé: la seule différence avec les atomes neutres, c'est qu'ici il y a un ingrédient de plus (valeur de E_p spécifique à chaque ion) à introduire dans le code.

Nos résultats obtenus par cette méthode semi-classique sont discutés et comparés à des résultats récents de chimie quantique (Kerkeni et al. 2003) dans le cas particulier des états $4p\ ^2P_{1/2}$, $4p\ ^2P_{3/2}$, $3d\ ^2D_{3/2}$ et $3d\ ^2D_{5/2}$ du CaII. Nous avons appliqué aussi notre méthode au cas des états $5p\ ^2P_{1/2}$ et $5p\ ^2P_{3/2}$ du SrII; ces calculs contribueront à l'interprétation de la polarisation linéaire importante de la raie 4078 Å du SrII (Bianda et al. 1998; Stenflo et al. 1980; Stenflo et al. 1983a; Stenflo et al. 1983b).

NB: Un article qui présente l'extension de notre méthode pour le cas des atomes une fois ionisés *(Derouich M., Sahal-Bréchot S., Barklem P.S.,* A&A, soumis dans A&A), est dans l'annexe C de ce mémoire.

7.2 Potentiel d'interaction

Le potentiel d'interaction électrostatique entre deux particules, de charges de noyaux Z_1 et Z_2, est donné par l'équation (5.3) (Figure 5.1):

$$V = \frac{Z_1 Z_2}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{Z_1}{r_2} - \frac{Z_2}{p_1} \tag{7.1}$$

Nous avons $Z_1 = 1$ et $Z_2 = 2$ dans une interaction entre l'atome d'hydrogène et un atome une fois ionisé. Le potentiel d'interaction devient donc:

$$V = \frac{2}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_2} - \frac{2}{p_1} = \frac{1}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_2} - \frac{1}{p_1} + V_{\text{ind}} \tag{7.2}$$

$V_{\text{ind}} = 1/R - 1/p_1$ représente l'interaction dite inductive[1] entre l'excès de charge dans l'atome ionisé et l'atome neutre d'hydrogène. Les éléments de matrice du potentiel effectif correspondant à l'interaction ion-hydrogène sont:

$$\begin{aligned} \langle M_l|V_{\text{eff}}|M_l\rangle &= E_{M_l} - E^0_{M_l} \\ &= \langle M_l|V|M_l\rangle + \sum_{M_l' \neq M_l} \frac{\langle M_l|V|M_l'\rangle\langle M_l'|V|M_l\rangle}{E^0_{M_l} - E^0_{M_l'}}, \end{aligned} \tag{7.3}$$

qui peuvent aussi s'écrire, en remplaçant V par $(V - V_{\text{ind}}) + V_{\text{ind}}$,

$$\begin{aligned} \langle M_l|V_{\text{eff}}|M_l\rangle &= \langle M_l|V|M_l\rangle \\ &+ \sum_{M_l' \neq M_l} \frac{\langle M_l|V - V_{\text{ind}}|M_l'\rangle\langle M_l'|V - V_{\text{ind}}|M_l\rangle}{E^0_{M_l} - E^0_{M_l'}} \\ &+ \sum_{M_l' \neq M_l} \frac{\langle M_l|V_{\text{ind}}|M_l'\rangle\langle M_l'|V_{\text{ind}}|M_l\rangle}{E^0_{M_l} - E^0_{M_l'}}. \end{aligned} \tag{7.4}$$

On applique ensuite l'approximation d'Unsöld en remplaçant le dénominateur de la contribution au second ordre par une énergie moyenne. Dans la première somme de l'equation (6.4) qui correspond à l'interaction $V - V_{\text{ind}}$, l'énergie moyenne E_p doit être calculée pour chaque cas (i.e. pour chaque état de chaque ion). Pour la deuxième somme, correspondant à l'interaction V_{ind}, l'énergie moyenne E_p est égale à $-4/9$ puisque ce potentiel est exactement le même que celui d'une interaction entre l'hydrogène neutre et l'hydrogène une fois ionisé H-H$^+$ (Unsöld 1955; Dalgarno & Lewis 1962, équation (16); voir aussi chapitre 5 pour des détails). L'équation (6.4) devient donc (Barklem 1998b; Barklem & O'Mara 1998d):

$$\begin{aligned} \langle M_l|V_{\text{eff}}|M_l\rangle &= \langle M_l|V|M_l\rangle - \frac{1}{E_p}(\langle M_l|V|M_l\rangle)^2 + \frac{1}{E_p}\langle M_l|V^2|M_l\rangle \\ &+ \frac{1}{E_p}(\langle M_l|V_{\text{ind}}|M_l\rangle)^2 - \frac{1}{E_p}\langle M_l|V_{\text{ind}}^2|M_l\rangle. \\ &- \frac{9}{4}[\langle M_l|V_{\text{ind}}^2|M_l\rangle - (\langle M_l|V_{\text{ind}}|M_l\rangle)^2] \end{aligned} \tag{7.5}$$

[1] i.e. correspond à la création, par l'excès de charge dans l'ion perturbé, d'un champ statique local au niveaux de l'atome de l'hydrogène induisant une transition virtuelle. Une transition virtuelle correspond à un processus qui viole la conservation de l'énergie.

7.3 Commentaires sur le choix de E_p

Pour les calculs précédents concernant les interactions entre atomes d'hydrogène et atomes neutres, nous avons négligé les différences d'énergie entre les niveaux excités de l'atome neutre et son niveau fondamental devant celles de l'atome d'hydrogène. Ainsi la valeur de l'énergie moyenne E_p dépend seulement des séparations entre les niveaux d'énergie de l'hydrogène, et est donc la même pour toutes les interactions entre atomes neutres et atomes d'hydrogène. Dans le cas des interactions entre atomes d'hydrogène et atomes une fois ionisés, les énergies de séparation des niveaux de l'ion $E_b^0 - E_b^j$ sont comparables aux énergies de séparation des niveaux de l'atome d'hydrogène $E_a^0 - E_a^i$. On peut toujours appliquer l'approximation d'Unsöld et donc remplaçer $E_a^0 - E_a^i + E_b^0 - E_b^j$ par une énergie moyenne E_p, mais E_p dépend dans ce cas de l'hydrogène et aussi de l'ion. Dans ce travail de thèse, E_p est égale à sa valeur à l'infini. Une valeur approriée de E_p est peut alors être calculée à partir de la formule d'Unsöld:

$$E_p = -\frac{2 < p_2^2 >}{C_6}, \tag{7.6}$$

1. $< p_2^2 >$, moyenne de la distance au carré entre l'électron de valence et le noyau de l'ion perturbé (Figure 5.1), est donné par

$$< p_2^2 >= \int_0^{+\infty} P_{nl}^2(p_2)\, p_2^2\, dp_2, \tag{7.7}$$

où P_{nl} est la fonction d'onde radiale Coulombienne avec un défaut quantique $\delta = n - n^*$ (Anstee 1992; Seaton 1958). Il est toujours possible d'estimer rapidement $< p_2^2 >$ en adoptant l'approximation hydrogénoïde où:

$$< p_2^2 >= \frac{n^{*2}}{2Z_2^2}[5n^{*2} + 1 - 3l(l+1)]. \tag{7.8}$$

Dans le cas de l'état $4p$ de CaII, l'application de cette formule approchée de l'approximation hydrogénoïde donne $< p_2^2 >= 26.86$ $(u.a.)$ qui est en assez bon accord avec la valeur calculée ici, après intégration sur les fonction d'ondes radiales Coulombiennes (éqution 7.8), où $< p_2^2 >= 22.25$ $(u.a.)$. Durant ce travail de thèse, les valeurs de $< p_2^2 >$ sont toujours calculées en utilisant l'équation (7.7).

2. C_6 est le coefficient de Van der Waals; ce coefficient est donné par la formule standard (voir par exemple, Goodisman 1973):

$$C_6 = \frac{3}{2}\sum_{k'\neq k}\sum_{l'\neq l}\frac{f_{kk'}^H f_{ll'}^A}{(E_{k'}^H + E_{l'}^A - E_k^H - E_l^A)(E_{k'}^H - E_k^H)(E_{l'}^A - E_l^A)}, \tag{7.9}$$

f_{kl} est la force d'oscillateur qui est généralement tabulée (Wiese et al. 1966, 1969; Theodosiou 1989; NIST; ...). À partir de l'équation (7.9), on peut montrer que si on se place dans le cas des interactions entre les atomes d'hydrogène et des atomes neutres on retrouve la relation (Goodisman 1973)

$$C_6 = \alpha < p_2^2 > \tag{7.10}$$

où

$$\alpha = \sum_{i\neq 0}\frac{f_{0i}^a}{(E_a^0 - E_a^i)} \tag{7.11}$$

est la polarisabilité de l'hydrogène. α est égale à 9/2 (Dalgarno 1962a) et donc E_p = - 2 $< p_2^2 >$ / C_6 = - $2/\alpha = -4/9$.

7.4 Calcul des taux de dépolarisation et des taux de transfert de polarisation

Pour déterminer les taux de dépolarisation et les taux de transfert de polarisation, il suffit de résoudre les mêmes équations couplées semi-classiques données dans le cas des atomes neutres. À chauqe état étudié (nl) correspondent $(2l+1)$ équations couplées et $(2l+1)^2$ éléments de matrice de diffusion S. Pour résoudre ces équations couplées et obtenir la matrice de diffusion S il faut calculer les $(l+1)$ potentiels RSU correspondant à chaque cas d'interaction ion-hydrogène afin de les introduire dans les $(2l+1)$ équations couplées. Le dénominateur moyen E_p remplaçant les différences d'énergie entre les niveaux d'énergie de l'ion et ceux de l'hydrogène est un ingrédient essentiel à déterminer. E_p est à calculer pour chaque ion à l'état (nl) avec la méthode décrite ci-dessus: c'est une étape supplémentaire par rapport au cas des interactions avec les atomes neutres afin de calculer avec précision les potentiels d'interactions RSU donnés par l'équation (7.5). Bien que pour les grandes distances de séparations le comportement de l'énergie d'interaction ion-hydrogène neutre soit en R^{-4} (et non en R^{-6} comme c'est le cas pour des interaction atome neutre-hydrogène), nous calculons C_6 car il est indispensable pour le calcul de E_p (7.6).

Après avoir obtenu les matrices de transitions $T = I - S$ dans la base (nlm_l) on passe à la base $(nlJM_J)$ avec l'équation (5.44). On calcule ensuite les probabilités de transitions dans la base des (OTI) avec les équations (5.45) et (5.49). Une intégration sur les paramètres d'impact suivi d'une intégration sur une distribution Maxwellienne des vitesses (équations 5.48 et 5.48) permet finalement de déterminer les taux de dépolarisation et de transfert de polarisation.

Les taux de dépolarisation et les taux de transfert de polarisation d'un niveau particulier d'un ion donné ne peuvent pas être déduits par interpolation ou extrapolation dans une table comme pour le cas des atomes neutres. Le calcul est nécessaire à chaque cas car il passe par le calcul de E_p à chaque fois. Dans la section (7.7) nous examinerons la dépendance des sections efficaces de dépolarisation en E_p, et il est important de montrer que les sections efficaces (et par la suite les taux correspondants) sont suffisammant stables vis-à-vis d'une certaine variation de E_p. Une stabilité des valeurs des sections efficaces signifie que même si on ne connaît pas avec précision les valeurs de E_p, qui sont reliées aux coefficients de Van der Waals C_6 (reliés à leur tour aux forces d'oscillateur), on s'attend à des valeurs de section efficaces assez précises. Nous reviendrons sur ce point par la suite (section 7.7).

7.5 Résultats pour le cas de Ca^+H

Les niveaux associés aux triplet infrarouge du CaII (8498 Å, 8542 Å et 8662 Å) sont $4p\ ^2P_{1/2}$, $4p\ ^2P_{3/2}$, $3d\ ^2D_{3/2}$ et $3d\ ^2D_{5/2}$. Les raies H (3969 Å) et K (3933 Å) ont les mêmes niveaux supérieurs que le triplet infrarouge du CaII (Figure 7.1). Notre méthode est appliquée pour calculer les taux de dépolarisation et de transfert de polarisation des niveaux du Ca^+ associés à ces raies. Il faut tout d'abord déterminer l'énergie moyenne E_p dans le cas des états p et d du calcium ionisé CaII qui nous intéresse ici. Le calcul de E_p passe par celui de C_6; Pour calculer C_6 il nous faut les valeurs de toutes les forces d'oscillateur de toutes les transitions associées aux états $(4s)$ de l'hydrogène et $4p$ et $3d$ du calcium ionisé (équation 7.11). Dans le cas de l'hydrogène dans son état fondamental, les forces d'oscillateur sont prises dans (Wiese et al. 1966). Pour les

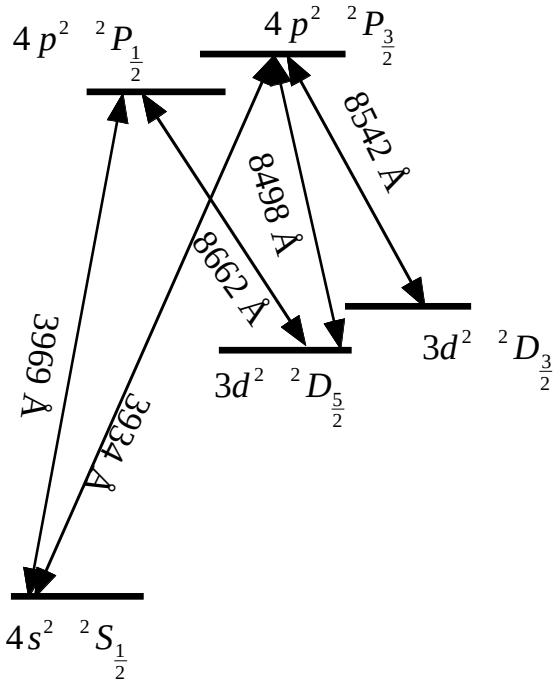

Figure 7.1: Une partie du diagramme du Grotrian de l'ion Call. Les niveaux supérieur et inférieur de la transition correspondant à la raie de résonance.

État	$< p_2^2 >$	C_6	E_p
$3d$	7.54	12.2	-1.236
$4p$	22.25	81.8	-0.544

Table 7.1: Valeurs de $< p_2^2 >$, la moyenne de la distance au carré entre l'électron de valence et le centre de l'ion CaII en fonction de l'état considéré ($3d$ et $4p$). C_6 est la constante de Van der Waals et $E_p = E_a^0 - E_a^i + E_b^0 - E_b^j$ est l'énergie moyenne correspondant aux interactions H ($4s$)-CaII ($3d$; $4p$).

états $4p$ et $3d$ et du CaII nous avons pris les valeurs de (Theodosiou 1989), mais puisque certaines valeurs manquent, nous avons complété la liste des valeurs nécessaires avec celles de (Wiese et al. 1969). Cette méthode était déjà appliquée par Barklem & O'Mara (1998d); les valeurs correspondantes de $< p_2^2 >$, C_6 et donc de E_p ($E_p = -2 < p_2^2 > /C_6$) sont reportées dans Table 7.1.

Les définitions et les notations des taux de dépolarisation et des taux de transfert de polarisation sont les mêmes que celles déjà introduites pour le cas des atomes. Notre méthode semi-classique permet donc de déterminer des taux de dépolarisation et des taux de transfert de polarisation pour un grand nombre d'ions. Heureusement, nous avons pu valider notre méthode en comparant nos résultats semi-classiques, pour le cas du CaII dans les états excités: $4p\ ^2P_{1/2}$, $4p\ ^2P_{3/2}$, $3d\ ^2D_{3/2}$ et $3d\ ^2D_{5/2}$, aux résultats obtenus par une méthode de chimie quantique (Kerkeni et al. 2003).

Pour l'état $4p\ ^2P_{1/2}$, $J = 1/2$ et donc $D^1(4\ 1\ 1/2, T)$ est le seul taux de dépolarisation existe non nul qui existe, en effet $D^0(4\ 1\ 1/2, T)$=0 parce que les collisions élastiques ne changent pas la population du niveau. $D^1(4\ 1\ 1/2, T)$ est représenté en fonction de la température locale du milieu sur la Figure 7.2. Une représentation analytique de ce taux de destruction de l'orientation de l'état $4p\ ^2P_{1/2}$ du calcium une fois ionisé est donnée par:

$$D^1(4\ 1\ 1/2,\ T) \ = \ 2.4767 \times 10^{-15}\ n_H(\frac{T}{5000})^{0.433}\ (\mathrm{rad.s^{-1}}). \tag{7.12}$$

Ce comportement en $AT^{(1-\lambda)/2}$ rejoint celui observé dans le cas des atomes (Derouich et al. 2003c) avec une valeur de l'exposant de vitesse $\lambda = 0.134$.

À l'état $4p\ ^2P_{3/2}$, sont associés les taux de dépolarisation $D^1(4\ 1\ 1/2,\ T)$, $D^2(4\ 1\ 1/2,\ T)$ et $D^3(4\ 1\ 1/2,\ T)$. On reporte sur la Figure 7.3 ces trois taux. La variation en fonction de la température des trois taux de dépolarisation de l'état $4p\ ^2P_{3/2}$ est très régulière et peut être représentée par les expressions analytique suivante:

$$\begin{aligned} D^1(4\ 1\ 3/2,\ T) &= 2.7993 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.418}\ (\mathrm{rad.s^{-1}}) \\ D^2(4\ 1\ 3/2,\ T) &= 5.2034 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.405}\ (\mathrm{rad.s^{-1}}) \\ D^3(4\ 1\ 3/2,\ T) &= 4.8807 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.411}\ (\mathrm{rad.s^{-1}}) \end{aligned} \tag{7.13}$$

Pour les états $3d\ ^2D_{3/2}$ et $3d\ ^2D_{5/2}$ les taux de dépolarisation sont représentés sur les Figures (7.3) et (7.4). Les expressions analytiques de ces taux en fonction de la température

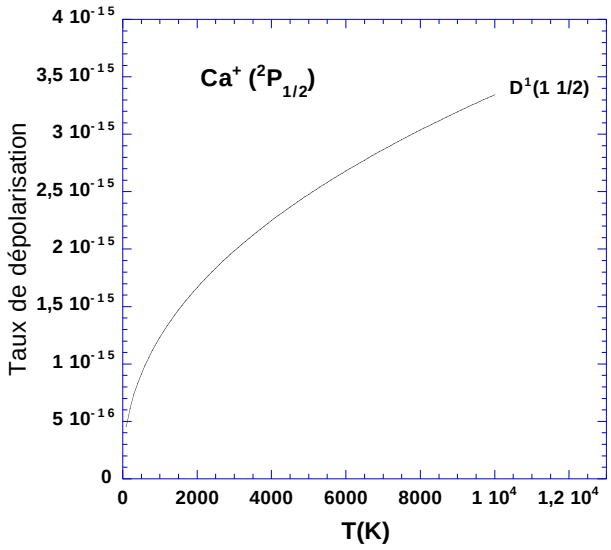

Figure 7.2: Variation du taux de destruction de l'orientation de l'état $^2P_{1/2}$, par unité de densité d'hydrogène, $D^1(4\ 1\ 1/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Le taux de destruction de l'orientation est en $\mathrm{rad.\ m^3\ s^{-1}}$.

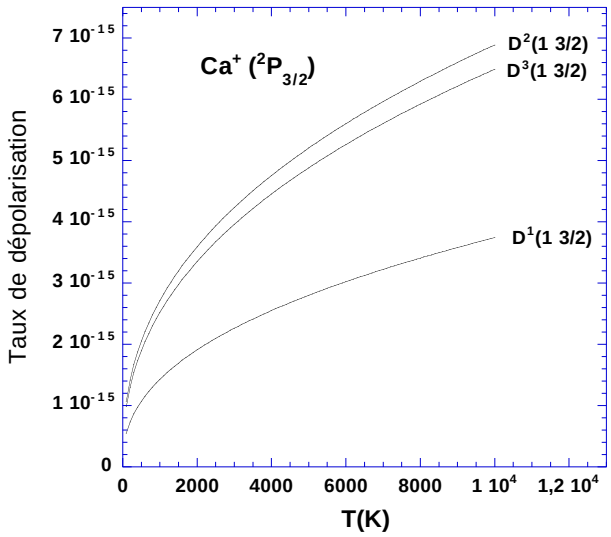

Figure 7.3: Variation des taux de dépolarisation, par unité de densité d'hydrogène, $D^k(4\ 1\ 3/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Les taux de dépolarisation sont en $\mathrm{rad.\ m^3\ s^{-1}}$.

sont données par,

$$\begin{aligned}
D^1(3\ 2\ 3/2,\ T) &= 1.9904 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.373}\ (\mathrm{rad.s^{-1}}) \\
D^2(3\ 2\ 3/2,\ T) &= 1.9943 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.398}\ (\mathrm{rad.s^{-1}}) \\
D^3(3\ 2\ 3/2,\ T) &= 1.0772 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.501}\ (\mathrm{rad.s^{-1}}),
\end{aligned} \tag{7.14}$$

et

$$\begin{aligned}
D^1(3\ 2\ 5/2,\ T) &= 2.0535 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.365}\ (\mathrm{rad.s^{-1}}) \\
D^2(3\ 2\ 5/2,\ T) &= 2.1120 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.384}\ (\mathrm{rad.s^{-1}}) \\
D^3(3\ 2\ 5/2,\ T) &= 2.3170 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.384}\ (\mathrm{rad.s^{-1}}) \\
D^4(3\ 2\ 5/2,\ T) &= 2.0127 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.407}\ (\mathrm{rad.s^{-1}}) \\
D^5(3\ 2\ 5/2,\ T) &= 1.2187 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.486}\ (\mathrm{rad.s^{-1}}).
\end{aligned} \tag{7.15}$$

Toutes les expressions analytiques des taux de dépolarisation sont données pour des températures $100 \leq T \leq 10000$ sauf pour $D^3(3\ 2\ 5/2,\ T)$ et $D^5(3\ 2\ 5/2,\ T)$ où $2500 \leq T \leq 10000$. Néanmoins, le calcul de ces deux taux est possible pour les autres températures où $100 \leq T \leq 2500$ (voir Figure 7.4 et Figure 7.5).

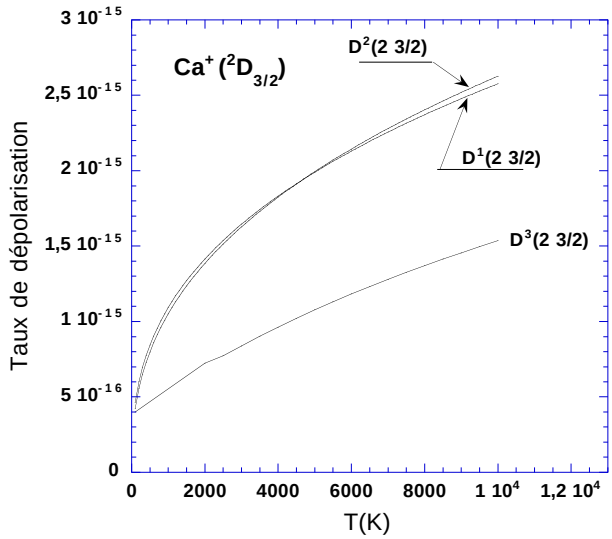

Figure 7.4: Variation des taux de dépolarisation, par unité de densité d'hydrogène, $D^k(3\ 2\ 3/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Les taux de dépolarisation sont en rad. $\mathrm{m}^3\ \mathrm{s}^{-1}$.

Les taux de transfert de population, de l'orientation et de l'alignement, entre les niveaux $4p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 4p\ ^2P_{3/2}$ et $3d\ ^2D_{3/2} \rightarrow 3d\ ^2D_{5/2}$, $(D^k(4\ 1\ 1/2 \rightarrow 4\ 1\ 3/2,\ T)$ et

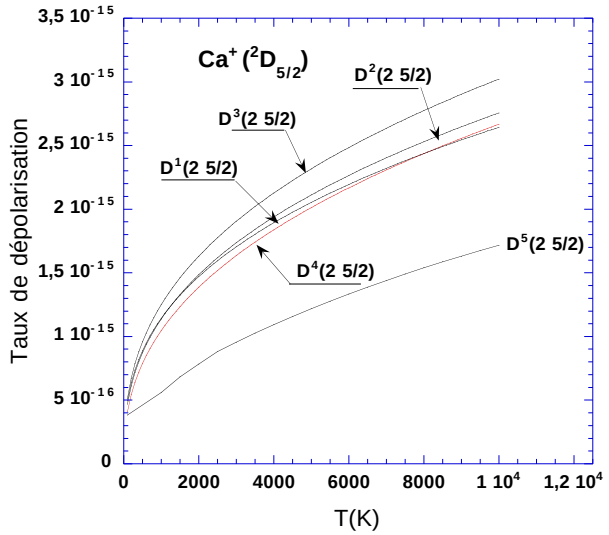

Figure 7.5: Variation des taux de dépolarisation, par unité de densité d'hydrogène, $D^k(3\ 2\ 5/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Les taux de dépolarisation sont en rad. m^3 s^{-1}.

$D^k1(4\ 1\ 1/2 \rightarrow 4\ 1\ 3/2,\ T))$ sont présentés sur la Figure 7.6 et la Figure 7.7 respectivement. $D^3(3\ 2\ 3/2 \rightarrow 3\ 2\ 5/2,\ T)$ ne peut pas être représenté par une expression analytique obéissant à la loi $B\ T^{(1-\lambda)/2}$. Les expressions analytiques en fonction de la température des autres taux de transfert de polarisation sont les suivantes:

$$\begin{aligned}
D^0(4\ 1\ 1/2 \rightarrow 4\ 1\ 3/2,\ T) &= 4.0307 \times 10^{-15} n_H (\frac{T}{5000})^{0.407} (\mathrm{rad.s}^{-1}) \\
D^1(4\ 1\ 1/2 \rightarrow 4\ 1\ 3/2,\ T) &= -1.1464 \times 10^{-15} n_H (\frac{T}{5000})^{0.314} (\mathrm{rad.s}^{-1}) \\
D^0(3\ 2\ 3/2 \rightarrow 3\ 2\ 5/2,\ T) &= 1.8061 \times 10^{-15} n_H (\frac{T}{5000})^{0.392} (\mathrm{rad.s}^{-1}) \\
D^1(3\ 2\ 3/2 \rightarrow 3\ 2\ 5/2,\ T) &= 1.6177 \times 10^{-16} n_H (\frac{T}{5000})^{1.401} (\mathrm{rad.s}^{-1}) \\
D^2(3\ 2\ 3/2 \rightarrow 3\ 2\ 5/2,\ T) &= 8.6286 \times 10^{-16} n_H (\frac{T}{5000})^{0.490} (\mathrm{rad.s}^{-1})
\end{aligned} \tag{7.16}$$

On rappelle que seuls les taux de transfert de polarisation d'ordre tensoriel paire sont intéressants dans le cadre de l'étude du second spectre solaire.

7.6 Comparaisons avec les résultats de chimie quantique

Dans le chapitre 6, les comparaisons de nos résultats pour le cas des atomes neutres avec des calculs récentes de chimie quantique (Derouich et al. 2003a) sont très encourageantes. De même ici on compare nos résultats obtenus par notre méthode semi-classique, dans le cas particulier du CaII, à ceux obtenus par une méthode sophistiquée de chimie quantique (Kerkeni et al. 2003). Nous comparons aussi nos taux avec les taux de dépolarisation obtenus en utilisant le potentiel asymptotique de Van der Waals.

Les comparaisons entre nos résultats et ceux de (Kerkeni et al. 2003) sont effectuées en tenant compte des différences entres les définitions adoptées ici et celles dans Kerkeni (2002a)

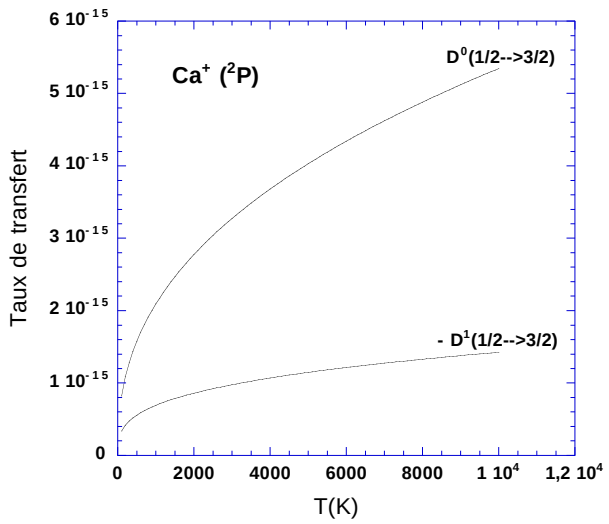

Figure 7.6: Variation des taux de transfert de polarisation, par unité de densité d'hydrogène, $D^k(4\ 1\ 1/2 \rightarrow 413/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Les taux de transfert de polarisation sont en $\mathrm{rad.\ m^3\ s^{-1}}$.

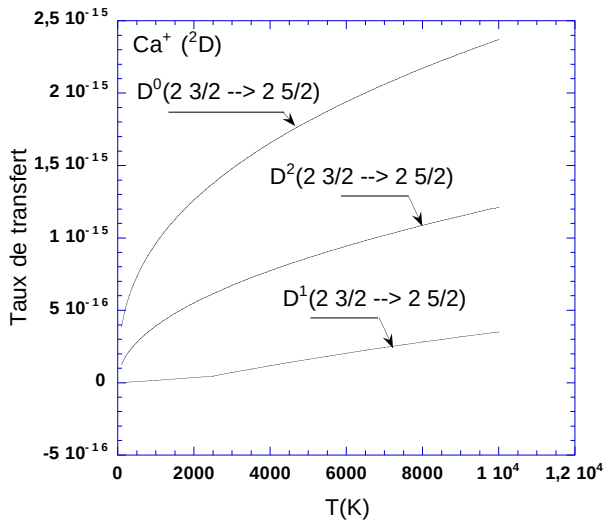

Figure 7.7: Variation des taux de transfert de polarisation, par unité de densité d'hydrogène, $D^k(3\ 2\ 3/2 \rightarrow 3\ 2\ 5/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Les taux de transfert de polarisation sont en $\mathrm{rad.\ m^3\ s^{-1}}$.

État	T=5000K			T=6000K		
	ce travail	KSF	VdW	ce travail	KSF	VdW
$4p\ ^2P_{3/2}$	5.2034	4.9988	2.2632	5.6017	5.3171	2.3990
$3d\ ^2D_{3/2}$	1.9943	1.9063	1.2854	2.1442	2.0740	1.3713
$3d\ ^2D_{5/2}$	2.1120	1.9682	1.1408	2.2653	2.1075	1.2135

Table 7.2: Comparaisons entre les taux de destruction d'alignement $D^2(n\ l\ J,\ T)/n_H$ pour les états: $4p\ ^2P_{3/2}$, $3d\ ^2D_{3/2}$ et $3d\ ^2D_{5/2}$ du CaII à T=5000K et T=6000K. KSF = (Kerkeni et al. 2003); VdW = Van der Waals. $D^2(nlJ)/n_H$ est en 10^{-15} rad. m^3 s^{-1}.

et Kerkeni et al. (2003). Nous avons déjà expliqué ce point en détail dans la section (6.5).

Les Figures (7.7), (7.8) et (7.9) montrent les résultats obtenus par les trois méthodes dans le cas de destruction de l'alignement (lié à la polarisation linéaire) pour les trois niveaux $4p\ ^2P_{3/2}$, $3d\ ^2D_{3/2}$, et $3d\ ^2D_{5/2}$ pour des températures variant entre 100 et 10000K, dans le cas de nos calculs et ceux que nous avons obtenus avec un potentiel de Van der Waals, et entre 200 et 10000K pour les résultats de Kerkeni (2003). La Table 7.2 présente les valeurs des taux de destruction de l'alignement à deux températures typiques T=5000K et T=6000K.

Comme dans le cas des atomes neutres, les différences entre nos taux de dépolarisation et ceux de Kerkeni et al. (2003) sont toujours inférieures à 20 % pour les températures solaires. Les taux de dépolarisation obtenus par application du potentiel de Van der Waals sont nettement plus petits. Le potentiel type Van der Waals sous-estime les taux de dépolarisation par un facteur 2 environ. L'accord remarquable entre nos résultats et ceux de chimie quantique est lié à la sensibilité des taux de dépolarisation aux régions intermédiaires de collisions. Nous allons tester cette sensibilité ainsi que la stabilité des valeurs des taux de dépolarisation vis-à-vis une variation de l'énergie d'Unsöld E_p.

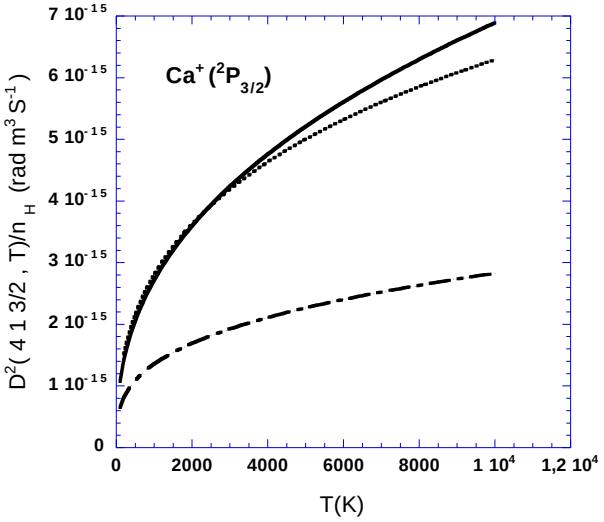

Figure 7.8: Variation des taux de destruction de l'alignement de l'état $^2P_{3/2}$, par unité de densité d'hydrogène, $D^2(4\ 1\ 3/2,\ T)/n_H$. La courbe continue représente nos résultats; la courbe en pointillée représente des résultats de chimie quantique (Kerkeni et al. 2003); la courbe en points-tirets représente les résultats obtenus avec un potentiel de Van der Waals.

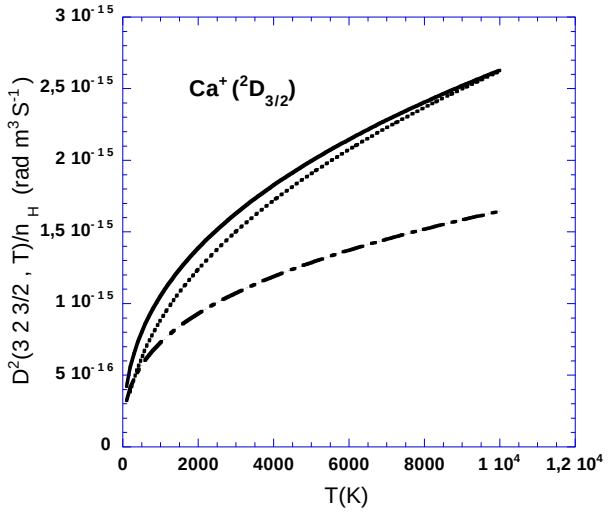

Figure 7.9: Variation des taux de destruction de l'alignement de l'état $^2D_{3/2}$, par unité de densité d'hydrogène, $D^2(3\ 2\ 3/2,\ T)/n_H$. La courbe continue représente nos résultats; la courbe en pointillée représente des résultats de chimie quantique (Kerkeni et al. 2003); la courbe en points-tirets représente les résultats obtenus avec un potentiel de Van der Waals.

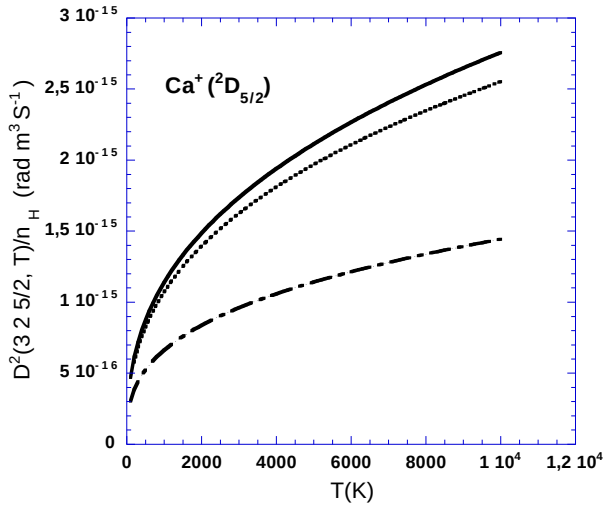

Figure 7.10: Variation des taux de destruction de l'alignement de l'état $^2D_{5/2}$, par unité de densité d'hydrogène, $D^2(3\ 2\ 5/2,\ T)/n_H$. La courbe continue représente nos résultats; la courbe en pointillée représente des résultats de chimie quantique (Kerkeni et al. 2003); la courbe en points-tirets représente les résultats obtenus avec un potentiel de Van der Waals.

7.7 Discussions

7.7.1 Dépendance des taux de dépolarisation aux différentes régions du potentiel

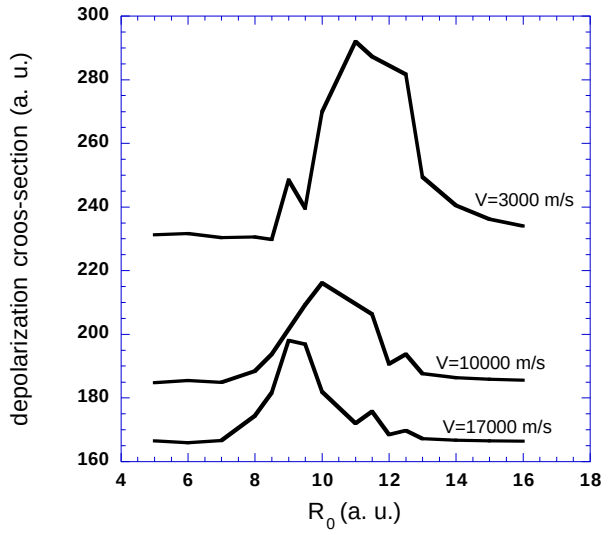

Figure 7.11: Variation des section efficaces de dépolarisation $\sigma^2(413/2, v)$ en fonction d'une perturbation du potentiel d'interaction centrée en R_0. Les sections efficaces sont calculées pour les trois vitesses relatives: 3 km s^{-1}, 10 km s^{-1}, 17 km s^{-1}.

Comme dans la section (6.5.1), nous multiplions le potentiel ($1s$, $4p\sigma$) par un facteur de grossissement de Gauss $G(R) = 1 + \exp(-(R - R_0)^2)$. Cette augmentation locale du potentiel fait augmenter la valeur de la section efficace de dépolarisation.

On remarque dans la Figure 7.11 que les pics de variation des sections efficaces sont situés dans les régions intermédiaires. Ceci veut dire que, dans ces régions, une petite variation du potentiel induit une grande variation de la section efficace qui en découle. On en conclut que ces régions du potentiel d'interaction sont déterminantes pour obtenir des taux de dépolarisation précis.

Dans les régions intermédiaires les potentiels *ab initio* de chimie quantique convergent vers les potentiels RSU (Derouich et al. 2003a; Derouich et al. 2003b; Derouich et al. 2003c; Anstee 1992; Anstee & O'Mara 1991; Anstee & O'Mara 1995; Anstee et al. 1997; Barklem et al. 1998a; Barklem & O'Mara 1997; Barklem 1998b) et c'est donc pour cette raison que nos résultats sont en bon accord avec ceux de chimie quantique. Par contre, les potentiels de Van der Waals qui varient en R^{-6} pour toutes les régions d'interaction sont plus petits dans les régions intermédiaires que les potentiel RSU et les potentiels *ab initio*. Les taux obtenus en remplaçant le potentiel RSU par un potentiel de Van der Waals[2] sont au moins deux fois plus que ceux obtenus par notre méthode ou par Kerkeni et al. (2003).

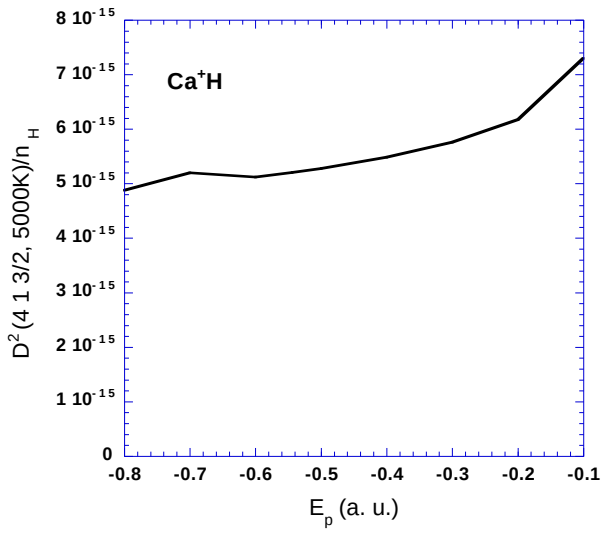

Figure 7.12: La variation du taux de dépolarisation $D^2(4\ 1\ 3/2, 5000K)/n_H$ en fonction de E_p.

7.7.2 Dépendance des taux de dépolarisation aux valeurs de E_p

Les taux de dépolarisation à 5000K sont calculés pour plusieurs valeurs de E_p (Figure 7.12). Nous avons trouvé qu'une augmentation de $|E_p|$ de 25 %, à partir de sa valeur calculée théoriquement 0.544, induit une variation de moins de 5 % dans $D^2(4\ 1\ 3/2,\ 5000K)/n_H$. La variation ici est une augmentation car si on augmente $|E_p|$, E_p diminue et donc le potentiel d'interaction augmente (voir l'expression du potentiel, équation 7.5). Par exemple si $|E_p|$ passe de sa valeur théorique $|E_p|$= 0.544 à une valeur de $|E_p| = 0.7$ (variation de 28.67 %), $D^2(4\ 1\ 3/2, 5000K)/n_H$ passe de 5.2034×10^{-15} à 5.2010×10^{-15} ce qui présente une variation presque nulle (0.04 %). 0.04 % ne doit pas être pris comme un taux de variation typique. Il faut comme même noter que pour $|E_p| = 0.6$ (variation de 10.28 %), $D^2(4\ 1\ 3/2, 5000K)/n_H$=$5.1170 \times 10^{-15}$ ce qui correspond à une variation de moins de 2 % (=1.66 %).

D'une façon générale, nous concluons que pour $0.544 \leq |E_p| \leq 0.75$, une variation de 25 % dans la valeur de $|E_p|$ introduit seulement un taux de variation standard inférieure à 5 %. Nous avons vérifié que la variation de $D^2(4\ 1\ 3/2,\ T)$ en fonction d'une variation de $|E_p|$ augmente avec la température mais reste toujours inférieur à 5 % pour $0.544 \leq |E_p| \leq 0.75$ et $T \leq 10000K$.

Si maintenant on diminue la valeur de $|E_p|$, la variation du taux de dépolarisation reste inférieure à 5 % pour $0.45 \leq |E_p| \leq 0.544$.

Ce test est rassurant quant à la possiblité d'appliquer notre méthode même si les valeurs de E_p, liées aux valeurs des forces d'oscillateur, ne sont pas connues avec précision. Mais ce résultat n'est pas général pour tous les ions car la Figure 7.12 montre que pour le cas des états ionique ayant une valeur de $|E_p| \leq 0.25$, les taux de dépolarisation dépendent assez fortement de la précision sur la valeur de $|E_p|$. Dans des cas de raies fortes de Ca^+, Mg^+, Sr^+ et Ba^+ les valeurs de $|E_p|$ sont toujours loin de 0.25; nous ne connaissons pas des cas où $|E_p| \leq 0.25$.

[2]Nous notons que des taux provenant aussi d'un potentiel de Van der Waals mais sans moyenner sur les vitesses et sans tenir compte des couplages entre les sous niveaux Zeeman, ce qui est souvent le cas dans la littérature, seront davantage plus petits.

7.8 Exemple d'application: la raie SrII 4078 Å

Des observations de polarisation linéaire au limbe du soleil (Bianda et al. 1998; Stenflo et al. 1980; Stenflo et al. 1983a; Stenflo et al. 1983b) montrent que la raie SrII 4078 Å est fortement polarisée. Cette raie correspond à la transition $5s \rightarrow 5p$. À notre connaissance il n'existe pas à ce jour des calculs de taux de dépolarisation concernant cette raie pourtant ces taux sont indispensables pour une analyse quantitative des observations (Bianda et al. 1998). Il s'agit donc d'un exemple concret de l'utilité de notre méthode. Nous l'avons appliquée aux états $5p\ ^2P_{1/2}$ et $5p\ ^2P_{3/2}$ du SrII.

D'abord il faut commencer par la détermination de l'énergie d'Unsöld E_p qui nécessite le calcul de C_6 et $< p_2^2 >$ (équations 7.7 et 7.9). Les valeurs de C_6 obtenus par cette méthode, dans le cas du strontium ionisé SrII, dans l'état $5p$, sont testées et discutées dans Barklem & O'Mara (1998d). Puis, le calcul de E_p est alors possible en calculant $< p_2^2 >$ donné par l'équation (7.7). Les valeurs de C_6, $< p_2^2 >$ et la valeur de E_p qui en découlent sont les suivant:

$$\begin{aligned} C_6 &= 104.3, \\ < p_2^2 > &= 29.41, \\ E_p &= -0.564. \end{aligned} \tag{7.17}$$

Ayant E_p, il reste maintenant à déterminer n^*. L'énergie du niveau $5p$ du SrII est 0.112 $u.a.$ (24516.65 cm^{-1}) et l'énergie d'ionisation du SrII est 0.4054 $u.a.$ (88927.552 cm^{-1}). L'application de l'équation (4.9) donne une valeur de $n^* = 2.61$.

Nous avons alors tous les ingrédients nécessaires pour faire tourner notre code et nous avons ainsi déterminé les taux de dépolarisation et de transfert de polarisation du SrII. À l'état $5p$ $^2P_{1/2}$ correspond un seul taux de dépolarisation dont l'expression analytique est:

$$D^1(5\ 1\ 1/2,\ T) = 2.7196 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.428}\ (\text{rad.s}^{-1}). \tag{7.18}$$

Pour l'état $5p\ ^2P_{3/2}$ nous avons obtenu:

$$\begin{aligned} D^1(5\ 1\ 3/2,\ T) &= 3.1560 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.418}\ (\text{rad.s}^{-1}) \\ D^2(5\ 1\ 3/2,\ T) &= 5.9776 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.406}\ (\text{rad.s}^{-1}) \\ D^3(5\ 1\ 3/2,\ T) &= 5.5413 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.410}\ (\text{rad.s}^{-1}). \end{aligned} \tag{7.19}$$

Ils n'existe que deux taux de transfert de polarisation car dans ce cas l'ordre tensoriel $k_{\max} =$ inf $(2J{=}2\ \times 1/2,\ 2J'{=}2\ \times 3/2){=}\ 2\ \times 1/2 = 1$. Les expressions de ces deux taux sont:

$$\begin{aligned} D^0(5\ 1\ 1/2 \rightarrow 5\ 1\ 3/2, T) &= 4.6184 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.409}\ (\text{rad.s}^{-1}) \\ D^1(5\ 1\ 1/2 \rightarrow 5\ 1\ 3/2, T) &= -1.5309 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.338}\ (\text{rad.s}^{-1}) \end{aligned} \tag{7.20}$$

Les Figures (7.13), (7.14) et (7.15) montrent les différents taux de dépolarisation et de transfert de polarisation associés au SrII dans l'état $5p$. Bien entendu, seuls les taux d'ordres pairs sont d'interêt dans l'analyse des observations de la polarisation linéaire.

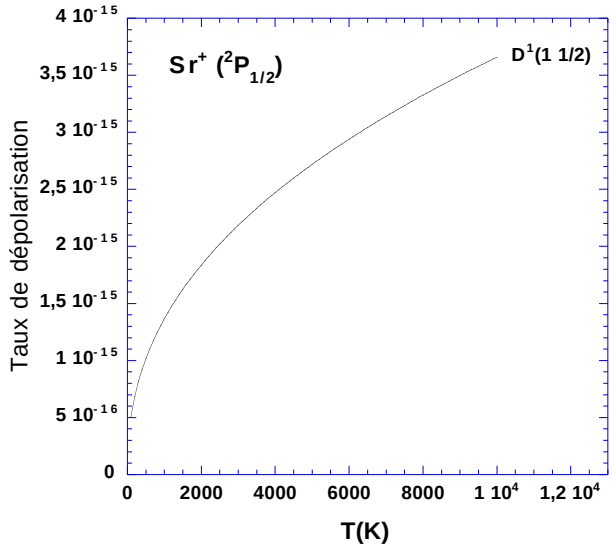

Figure 7.13: Variation du taux de destruction de l'orientation de l'état $5p\ ^2P_{1/2}$, par unité de densité d'hydrogène, $D^1(5\ 1\ 1/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Le taux de destruction de l'orientation est en $\mathrm{rad.\ m^3\ s^{-1}}$.

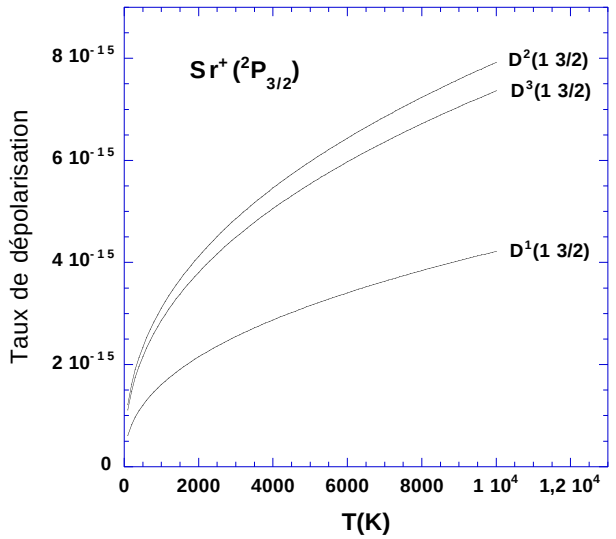

Figure 7.14: Variation des taux de dépolarisation, par unité de densité d'hydrogène, $D^k(5\ 1\ 3/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Les taux de dépolarisation sont en $\mathrm{rad.\ m^3\ s^{-1}}$.

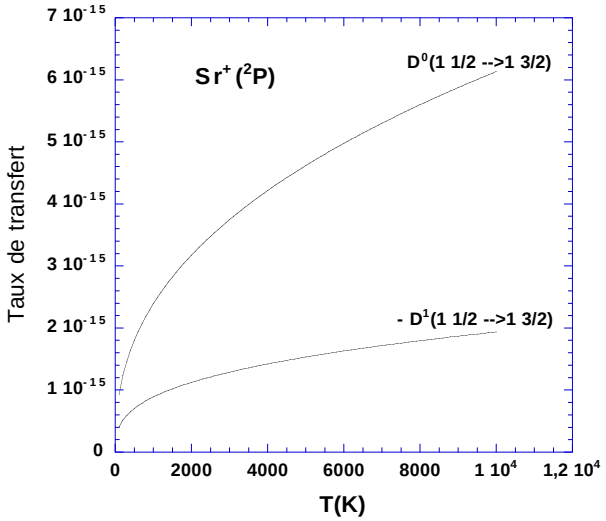

Figure 7.15: Variation des taux de transfert de polarisation, par unité de densité d'hydrogène, $D^k(n\ 1\ 1/2 \rightarrow n13/2,\ T)/n_H$, en fonction de la température locale. Ces taux sont en rad. $\mathrm{m}^3\ \mathrm{s}^{-1}$.

7.9 Conclusion

En utilisant cette méthode, le calcul des taux de dépolarisation et les taux de transfert de polarisation est possible pour un grand nombre d'ions. Il suffit à chaque fois de calculer la valeur de E_p et n^* qui dépendent de l'état étudié.

Le cas particulier du calcium une fois ionisé CaII est important par ce que des calculs de chimie quantique sont disponibles (Kerkeni et al. 2003). Les comparaisons entre nos résultats et ceux de chimie quantique constituent un bon test pour valider cette extension de notre méthode au cas des ions une fois ionisés.

Les méthodes de chimie quantique sont spécifics à un cas donné et un calcul quantique doit être mené à chaque fois où une demande se présente pour expliquer des observations données. Un exemple d'application, qui traite le cas important de la raie SrII 4078 Å, montre la souplesse de notre méthode quant à son application dans un cas quelconque d'un problème astrophysique.

Chapitre 8

Application: mesure du champ magnétique par interprétation des mesures de polarisation linéaire de la raie SrI 4607 Å

8.1 Introduction

Le phénomène de l'assombrissement centre-bord est à l'origine de la polarisation linéaire de résonance observée au limbe du soleil. Cette polarisation est due à la diffusion du rayonnement incident anisotrope. En l'absence de champ magnétique, la direction de polarisation du rayonnement diffusé est parallèle au bord solaire. L'existence de champ magnétique faible et dirigé vers l'observateur diminue la polarisation linéaire et fait tourner la direction de la polarisation (chapitre 2): c'est l'effet Hanle.

Pour les raies du second spectre solaire la polarisation observée est plus faible que la polarisation calculée en l'absence du champ magnétique, mais la direction de la polarisation observée reste parallèle à la direction tangentielle au limbe du soleil. Ceci paraît être en contradiction avec l'effet Hanle. On attribue ce résultat à l'existence d'un champ magnétique turbulent qui détruit la polarisation linéaire mais ne change pas la direction de polarisation (voir chapitre 2). L'existence de ce champ faible turbulent semble être une réalité fondée par plusieurs travaux, le sujet actuel de débat est plutôt l'intensité de ce champ à différentes distances de la surface du soleil.

L'analyse des taux de polarisation linéaire observés représente la principale possibilité, et peut être la seule, pour mesurer de l'intensité du champ magnétique turbulent dans les régions calmes du soleil. Nous avons analysé les observations des taux de polarisation linéaire de la raie SrI 4607 Å en terme de champ magnétique turbulent. Ces taux de polarisation ont été mesurés par V. Bommier et G. Molodij les 7, 8 et 9 Décembre 2002 avec THEMIS.

NB: dans l'Annexe C nous reproduisons, telqu'elle est, la version révisée de l'article *Bommier V., Derouich M., Landi Degl'Innocenti E., Molodij G., & Sahal-Bréchot S., 2004, soumis dans* A&A, qui reprend les résultats de ce chapitre en mettant plus l'accent sur les observations. Deux améliorations sont apportées dans cette nouvelle version : (1) prise en compte du profil instrumental dans le calcul du profil théorique (2) prise en compte de la lumière diffusée.

8.2 Pourquoi la raie SrI 4607 Å?

La raie SrI 4607 Å est l'une des plus polarisées dans le second spectre solaire. De plus il s'agit d'un cas relativement simple où l'approximation de l'atome à 2 niveaux est suffisante

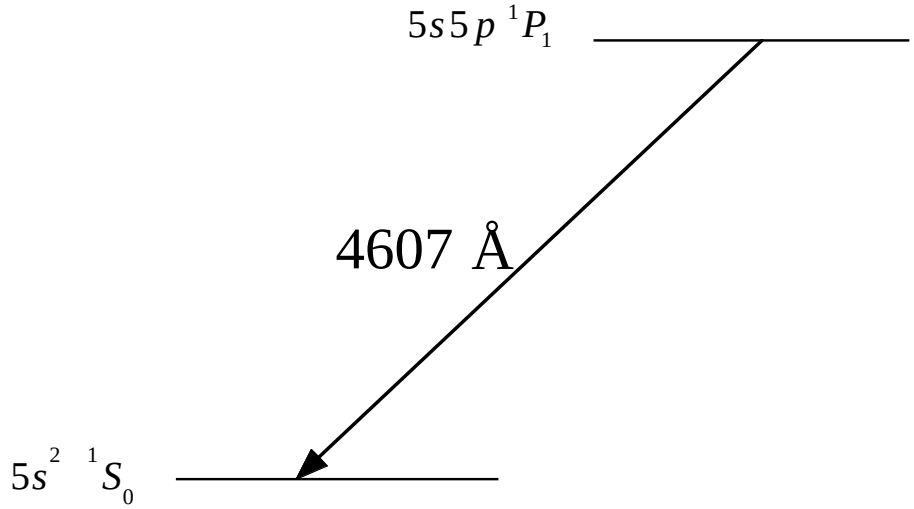

Figure 8.1: Les niveaux supérieur et inférieur de la transition correspondant à la raie de résonance SrI 4607 Å.

pour décrire le modèle atomique (Figure 8.1). Cela nous permet d'utiliser le code de transfert de rayonnement en présence de champ magnétique associé au formalisme développé par Landi Degl'Innocenti, Bommier et Sahal-Bréchot (1990). Cette raie relie un niveau supérieur $J' = 1$ avec un niveau inférieur $J = 0$. Le facteur de Landé dans le niveau supérieur est $g_{J'} = 1$. Le niveau inférieur n'est pas polarisable.

8.3 Formation des raies polarisées dans l'atmosphère solaire

8.3.1 Création de la polarisation

Dans le cas où l'atome est excité par un rayonnement isotrope, tous les sous-niveaux Zeeman sont peuplés de façon statistiquement égale et par la suite le rayonnement diffusé dans n'importe quelle direction est un mélange incohérent d'états: il est par conséquent non polarisé.

Par contre, à la surface du soleil, le rayonnement éclairant l'atome de strontium est anisotrope à cause de l'assombrissement centre bord: le rayonnement qui excite l'atome en venant le long de la verticale est plus intense que celui venant des directions horizontales. Sous l'effet de cette lumière naturelle partiellement directive (anisotrope), se créent des cohérences et des différences de population entre sous-niveaux Zeeman des états atomiques. L'atome de SrI, excité par ce rayonnement anisotrope, émet donc en se désexcitant de la lumière partiellement polarisée linéairement de longueur d'onde 4607 Å. Cette polarisation linéaire est mise en évidence en observant, à un angle presque droit[1], la raie émise au bord du soleil.

8.3.2 Variation de la polarisation

Les processus succeptibles de créer ou de détruire la polarisation sont respectivement: les processus radiatifs, les processus collisionnels et le champ magnétique.

[1] i.e. diffusion à $\alpha \sim 90$ degrés où α est l'angle entre le rayon solaire, direction moyenne du rayonnement incident, et la ligne de visée

Processus radiatifs

L'atome émetteur interagit avec un bain de photons, cette interaction induit une variation de la matrice densité qui doit être prise en compte dans les EES. C'est l'anisotropie du bain de photons qui crée la polarisation atomique sous l'effet de l'absorption. L'émission transfère cette polarisation au rayonnement diffusé.

Collisions isotropes

1. Les collisions isotropes, avec les atomes d'hydrogène, apportent deux formes de perturbation aux raies observées. En effet, le profil d'intensité d'une raie polarisée émise par un atome après avoir entrer en collisions avec les atomes d'hydrogène est déplacé et se trouve élargi; de plus, le taux de polarisation de la raie diminu.

   Il faut signaler une des différences essentielles entre l'élargissement (et le déplacement) des raies et la dépolarisation collisionnelle: l'altération du profil d'intensité de la raie émise fait intervenir l'effet de la collision à la fois sur l'état fondamental et sur l'état excité, au contraire la dépolarisation est toujours un phénomène interne à un niveau.

   La dépolarisation collisionnelle correspond statistiquement à un retour à l'égalisation des populations des différents sous-niveaux Zeeman d'un niveau donné. Dans le deuxième spectre solaire, les collisions dépolarisantes sont dues à des collisions avec les atomes d'hydrogène de l'atmosphère, et les taux de dépolarisation sont calculés par notre méthode semi-classique.

2. Les collisions isotropes inélastiques, entre l'atome émetteur et les électrons, doivent être prises en compte dans les EES. Les taux d'excitation de l'atome d'un niveau (lJ) à un niveau $(l'J')$ $(l' \neq l)$, associés à ces colllisions, sont beaucoup plus grands que ceux entre l'atome émetteur et les atomes neutres d'hydrogène. Les taux d'excitation et de désexcitation par collisions isotropes inélastiques avec les atomes neutres d'hydrogène seront donc négligés, pareillement dans le cas inverse de désexcitation.
   Dans le cas qui nous intéresse ici, il s'agit d'un atome à deux niveaux avec un niveau inférieur (fondamental) sans polarisation. L'excitation (passage de l'état fondamental à l'état excité) ne peut transmettre à l'état final que l'ordre $k = 0$ (population).

Champ magnétique turbulent

En présence d'un champ magnétique turbulent on observe une diminution de la polarisation linéaire (dépolarisation). Lorsque la direction du champ magnétique est aléatoire (champ magnétique turbulent), il n'y a plus de rotation de la direction de polarisation mais la dépolarisation demeure (section 2.5.1). Les champs magnétiques de faible intensité, présents dans les régions calmes du soleil, détruisent partiellement les cohérences atomiques et donc dépolarisent la raie observée.

8.3.3 Équations de base en champ magnétique nul

L'idée est de:

– évaluer les contributions de tous les processus non-magnétiques qui interviennent dans la formation de la raie polarisée

– ensuite, introduire l'effet du champ magnétique dans les équations couplées du transfert de rayonnement et d'équilibre statistique: le "bon" champ magnétique est celui qui correspond à une polarisation linéaire théorique égale à la polarisation observée.

Collisions dépolarisantes

Nous tenons compte des collisions dépolarisantes avec l'hydrogène neutre, et nous notons par

$$- D^k(5\ 1\ 1, T)\ {}^{5\,1\,1}\rho^k_q, \tag{8.1}$$

le taux de variation de l'élément ${}^{5\,1\,1}\rho^k_q$ de la matrice densité, décrivant l'état excité $5s5p$, dû aux collisions isotropes avec l'hydrogène. $D^k(5\ 1\ 1, T)$ est le taux de dépolarisation collisionnelle obtenu avec notre méthode semi-classique (chapitres 4, 5 et 6). En effet, notre méthode est générale et il suffit de l'appliquer au cas de l'état $5s5p$ du SrI pour calculer $D^k(5\ 1\ 1, T)$. Pour le terme $5s5p\ {}^1P_1$, J'=1, et par conséquent, $0 \leq k \leq 2$. $D^2(5\ 1\ 1, T)$ est le seul taux d'ordre pair non-nul.

Le calcul de $D^2(5\ 1\ 1, T)$ peut se faire de deux manières:

– interpolation entre les résultats que nous avons obtenu dans le cas général d'un atome dans l'état $({}^1P_1)$ (section 6.2.1).

– calcul direct en introduisant dans le code interactif que nous avons développé la valeur $n^* = 2.129$. Dans ce code un programme spécifique est consacré au cas $k = 2$ (alignement) et $l = 1$ (états p).

Bien entendu ces deux méthodes donnent pratiquement le même résultat. L'interpolation permet de déterminer immédiatement la valeur de $D^2(5\ 1\ 1, T)$, et un calcul direct avec notre code ne prend que très peu de temps (une dizaine de minutes). La variation de $D^2(5\ 1\ 1, T)$ en fonction de la température est très régulière et peut être représentée par:

$$D^2(5\ 1\ 1, T) = n_H\ 1.3639\ \times 10^{-8}\ (\frac{T}{5000})^{0.3739}\ \text{rad. s}^{-1}, \tag{8.2}$$

n_H est la densité d'hydrogène neutre dans le milieu. L'erreur attendue sur la valeur de $D^2(5\ 1\ 1, T)$ est discutée au section (6.5.1).

Collisions inélastiques

Un autre type de collisions doit être pris en compte dans l'équation pilote: il s'agit des collisions isotropes inélastiques avec les électrons dont la distribution des vitesses est Maxwellienne. La probabilité d'excitation de l'état fondamental $5s^2$ à l'état $5s5p$ du SrI, par ces collisions inélastiques, est noté C_{01}. Pour l'état $5s^2$, $J = 0$ et donc $k = 0$ nécessairement: cet état ne peut pas être aligné et C_{01} ne transmet que l'ordre $k = 0$ (la population). Par conséquent ce processus ne peut agir que sur ${}^{5\,1\,1}\rho^0_0$, sa contribution aux EES est donné par

$$\frac{1}{\sqrt{3}} C_{01}\ {}^{5\,0\,0}\rho^0_0\ \delta_{q,0}\ \delta_{k,0}. \tag{8.3}$$

Quant au processus inverse, la désexcitation par collisions inélastiques avec les électrons, il introduit, pour tous les éléments multipolaires de la matrice densité de l'état $5s5p$, une même relaxation donnée par

$$- C_{10}\ {}^{5\,1\,1}\rho^k_q. \tag{8.4}$$

Puisque les électrons perturbateurs ont une distribution de vitesses isotrope-Maxwellienne, la microréversibilité permet d'écrire:

$$C_{10} = \frac{1}{3}\, C_{01}\ \exp(\frac{E_{5s5p}}{k_B T}), \tag{8.5}$$

où $E_{5s5p} = 21698.5$ cm^{-1} est l'énergie qui correspond à l'état $5s5p$ et $k_B = 1.38\ 10^{-16}$ ergs K^{-1} est la constante de Boltzmann. T, température du milieu, est donnée par le modèle d'atmosphère de Maltby et al. (1986) extrapolé au grandes profondeurs (Bommier et al. 2004). Les taux de collisions inélastiques avec les électrons sont calculés par la méthode semi-classique de Seaton (1962) et Sahal-Bréchot (1969a, 1969b). Cette méthode est améliorée en tenant compte du transfert du moment cinétique de l'électron pendant la collision (Bommier, à paraître). Nous avons vérifié que cette méthode de calcul des taux des collisions inélastiques est en bon accord avec la méthode de Van Regemorter (1962) (Faurobert et al. 1995 et Faurobert et al. 2001 ont utilisé cette dernière méthode dans le cadre de l'interprétation de la polarisation linéaire de la raie de SrI 4607 Å).

Processus radiatifs: équation d'équilibre statistique

L'interaction atome-photons introduit, bien entendu, une perturbation de l'état de l'atome émetteur ce qui implique une variation de la matrice densité décrivant son état interne. Cette interaction est due essentiellement aux émissions spontanées et aux absorptions. L'émission stimulée est négligée devant l'émission spontanée car nous sommes dans la limite du champ de rayonnement faible (cette approximation est généralement satisfaite dans le cas de raies optiques solaires). On introduit le terme de relaxation due à l'émission spontanée

$$-A_{10}\ {}^{5\,1\,1}\rho^k_q, \tag{8.6}$$

$A_{10} = 2.01\ 10^8$ s^{-1} (NIST 2003) est le coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée pour la raie 4607 Å du SrI. Dans l'équation d'évolution des éléments de matrice du niveau supérieur de transition, le terme correspondant au pompage optique par absorption est (Landi Degl'Innocenti 1984; Landi Degl'Innocenti 1985):

$$+\, B_{01}\ \frac{1}{\sqrt{3}}\ (-1)^q\ w^{(k)}_{10}\ \bar{J}^k_{-q}(\nu_0)\ {}^{5\,0\,0}\rho^0_0, \tag{8.7}$$

où:

- $w^{(k)}_{10}$ est donné par,

$$w^{(k)}_{10} = (-1)^{1+1}\ \frac{1}{\sqrt{3}}\ \left\{ \begin{array}{ccc} 1 & 1 & k \\ 1 & 1 & 0 \end{array} \right\}, \tag{8.8}$$

  les entités entre accolades étant des coefficients $6j$ (Messiah 1961). A cause des conditions d'inégalités triangulaires, seuls $w^{(0)}_{10} = 1$, $w^{(1)}_{10} = -1$ et $w^{(2)}_{10} = 1$ sont non nuls.

- B_{01} est le coefficient d'Einstein pour l'absorption relié à A_{10} par la relation habituelle:

$$\frac{c^2}{2\ h\ \nu_0^3} A_{10} = \frac{1}{3}\ B_{01}, \tag{8.9}$$

  ν_0, c et h sont respectivement la fréquence associée à la raie SrI 4607 Å, la vitesse de la lumière dans le vide et la constante de Planck.

– $\bar{J}^k_q(\nu_0)$ est un élément du tenseur de rayonnement incident, exprimé dans la base des tenseurs irréductibles,

$$\bar{J}^k_q(\nu_0) = \int_0^\infty d\nu \phi(\nu_0 - \nu) \oint \frac{d\Omega}{4\pi} \sum_i \mathcal{T}^k_q(i,\Omega) I_i(\nu,\Omega) \tag{8.10}$$

$\mathcal{T}^k_q(i,\Omega)$ est un tenseur sphérique dont l'expression générale est donnée dans l'annexe de Landi Degl'Innocenti (1985). $\phi(\nu_0 - \nu)$ est le profil d'absorption centré à la fréquence ν_0. $I_i(\nu,\Omega)$ est le $i$ème paramètre de Stokes (i=0, 1, 2, 3 pour I, Q, U et V respectivement), se propageant dans une direction repérée par l'angle solide Ω, solution de l'équation de transfert de rayonnement.

Processus radiatifs: l'équation de transfert du rayonnement polarisé

Nous nous plaçons dans le repère (xyz) dont l'axe de quantification (Oz) est la verticale de l'atmosphère. Nous allons adopter l'approximation plan-parallèle (chapitre 2), il existe donc une symétrie cylindrique autour de l'axe (Oz) (Figure 8.2). En effet, l'approximation de l'atmosphère plan-parallèle est vérifiée car l'épaisseur de l'atmosphère est très petite devant le rayon solaire. Seuls les deux paramètres de Stokes I et Q sont non nuls, ces deux paramètres sont observés le long de (Ox) et ne dépendent que de μ=cos θ, où θ est l'angle héliocentrique.

Le niveau fondamental du strontium n'étant pas polarisable et comme de plus on considère un régime champ magnétique faible[2] (effet Hanle), la matrice d'absorption est diagonale et les équations de transfert de rayonnement sont découplées:

$$\begin{aligned} \frac{dI(\nu,\mu)}{ds} &= -k_I I(\nu,\mu) + \epsilon_I(\nu,\mu) \\ \frac{dQ(\nu,\mu)}{ds} &= -k_I Q(\nu,\mu) + \epsilon_Q(\nu,\mu). \end{aligned} \tag{8.11}$$

k_I est le coefficient d'absorption correspondant à I, ϵ_I et ϵ_Q sont les émissivités correspondants à I et Q respectivement. ϵ_I dépend de la population et de l'alignement du niveau supérieur ($5s5p$ $^1P_1$) et ϵ_Q dépend seulement de l'alignement de ce niveau (Manso Sainz & Landi Degl'Innocenti 2002). Le référentiel est ici celui de l'atmosphère, ou celui du bord solaire.

On peut définir une fonction source pour chaque paramètre de Stokes et écrire une solution formelle pour chaque équation de transfert. Les paramètres de Stokes (Q et I) en un point du milieu sont déterminés en intégrant le long du rayon lumineux la fonction source qui correspond à chaque paramètre, multipliée par le facteur d'atténuation. Ces solutions formelles sont ensuite introduites dans les EES (Landi Degl'Innocenti et al. 1990).

Dans un repère ayant son axe (Oz) normal à l'atmosphère, $\bar{J}^k_q(\nu_0)$ est identiquement nul si $q \neq 0$; seuls $\bar{J}^0_0(\nu_0)$ et $\bar{J}^2_0(\nu_0)$ sont non-nuls (Landi Degl'Innocenti 1984). De plus, comme le rayonnement incident est non polarisé, l'équation (8.10) s'écrit explicitement sous la forme:

$$\begin{aligned} \bar{J}^0_0 &= \int_0^\infty d\nu \phi(\nu_0 - \nu) \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I(\nu,\mu) d\mu \\ \bar{J}^2_0 &= \int_0^\infty d\nu \phi(\nu_0 - \nu) \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{1}{2\sqrt{2}} [(3\mu^2 - 1) I(\nu,\mu)] d\mu \end{aligned} \tag{8.12}$$

[2] Dans le cas d'un champ magnétique plus fort, lorsque l'effet Zeeman entre en jeu, les éléments de la matrice d'absorption, associés aux autres paramètres de Stokes (autres que l'intensité), deviennent importantes et la matrice d'absorption n'est plus diagonale. Par conséquent, les équations de transfert des différentes paramètres de Stokes peuvent être couplées dans ce cas.

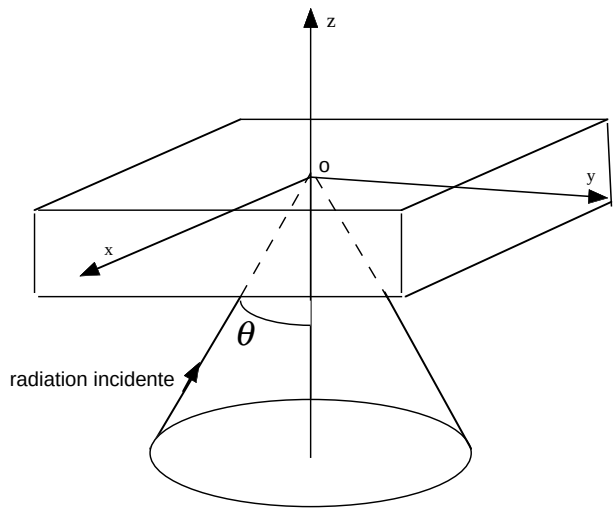

Figure 8.2: Symétrie axiale du rayonnement incident dans l'approximation plan-parallèle. L'axe de symétrie (Oz) est normal à l'atmosphère et θ est l'angle héliocentrique entre la direction du rayonnement et (Oz).

$\mu = cos\theta$, spécifie l'orientation de chaque rayon incident[3].

8.3.4 Polarisation en champ magnétique nul

On suppose que l'approximation des impacts est valable, et par conséquent la durée d'une collision est très petite devant le temps séparant deux collisions successives et aussi très petite devant la durée de vie de l'état $5s5p$ du SrI. Dans ces conditions il ne peut pas y avoir de photon émis ou absorbé pendant la collision. Les contributions radiatives et collisionnelles, ci-dessus, sont découplées et il suffit de les additionner dans les EES.
Les EES dans une atmosphère non-magnétisée, dans le repère (xyz) sont alors données par:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d\,{}^{5\,1\,1}\rho^k_q}{dt}\right)_{\text{non-magnétique}} &= -D^k(5\ 1\ 1,T)\,{}^{5\,1\,1}\rho^k_q \\
&\quad -C_{10}\,{}^{5\,1\,1}\rho^k_q \\
&\quad +\frac{1}{\sqrt{3}}\,C_{01}\,{}^{5\,0\,0}\rho^k_q\delta_{q,0}\,\delta_{k,0} \\
&\quad -A_{10}\,{}^{5\,1\,1}\rho^k_q \\
&\quad +B_{01}\,\frac{1}{\sqrt{3}}\,(-1)^q\,w^{(k)}_{10}\,\bar{J}^k_{-q}(\nu_0)\,{}^{5\,0\,0}\rho^0_0
\end{aligned} \tag{8.13}$$

Dans une situation statique où $\left(\frac{d\,{}^{5\,1\,1}\rho^k_q}{dt}\right)_{\text{non-magnétique}} = 0$,

$$\begin{aligned}
\left({}^{5\,1\,1}\rho^k_q\right)_{\text{non-magnétique}} &= \frac{B_{01}}{(D^k(5\ 1\ 1,T)+C_{10}+A_{10})}\frac{1}{\sqrt{3}}\,(-1)^q\,w^{(k)}_{10}\,\bar{J}^k_{-q}(\nu_0)\,\left({}^{5\,0\,0}\rho^0_0\right)_{\text{non-magnétique}} \\
&\quad +\frac{C_{01}}{(D^k(5\ 1\ 1,T)+C_{10}+A_{10})}\,\frac{1}{\sqrt{3}}\,\left({}^{5\,0\,0}\rho^0_0\right)_{\text{non-magnétique}}\,\delta_{q,0}\,\delta_{k,0}
\end{aligned} \tag{8.14}$$

[3]La polarisation est donnée en fonction de μ qui est relié à la distance d du point d'observation par rapport au bord du soleil par la relation $\mu = [1-(1-d/R_\odot)^2]^{1/2} \simeq [2d/R_\odot]^{1/2}$. $R_\odot$ est le rayon du soleil.

Les composantes d'ordre $k = 1$ de la matrice densité atomique, ${}^{5\,1\,1}\rho^1_q$, desquelles dépend la polarisation circulaire ne sont liées qu'entre elles et sont donc nulles puisqu'il n'y a pas de source de polarisation circulaire (chapitre 3). De plus, dans un repère où il y a symétrie cylindrique autour de l'axe (Oz), ce qui est le cas si l'axe (Oz) est la verticale de l'atmosphère, les éléments $\bar{J}^k_q$ avec $q \neq 0$ sont nuls. La résolution des EES correspond à la détermination des deux inconnues ${}^{5\,1\,1}\rho^2_0$ et ${}^{5\,1\,1}\rho^0_0$ en chaque point du milieu où on connaît formellement $\bar{J}^2_0(\nu_0)$ et $\bar{J}^0_0(\nu_0)$.

Le code que nous avons utilisé résout de manière globale les équations couplées de transfert de rayonnement et d'équilibre statistique. Ce code est associé au formalisme développé, pour un atome à deux niveaux dont le niveau fondamental est totalement dépolarisé, par Landi Degl'Innocenti et al. 1990 (voir aussi Bommier et al. 1991).

Nous avons trouvé, comme on s'y attendait, que la polarisation calculée théoriquement, selon le formalisme de Landi Degl'Innocenti et al. 1990, est nettement supérieure à celle observée. Un autre phénomène dépolarisant doit être alors pris en compte dans nos EES de façon à obtenir une polarisation théorique égale à la polarisation observée. C'est l'effet d'un champ magnétique local, ce champ ne change pas la direction de polarisation et doit donc être turbulent.

8.3.5 Effet d'un champ magnétique

Champ magnétique ayant une direction donnée

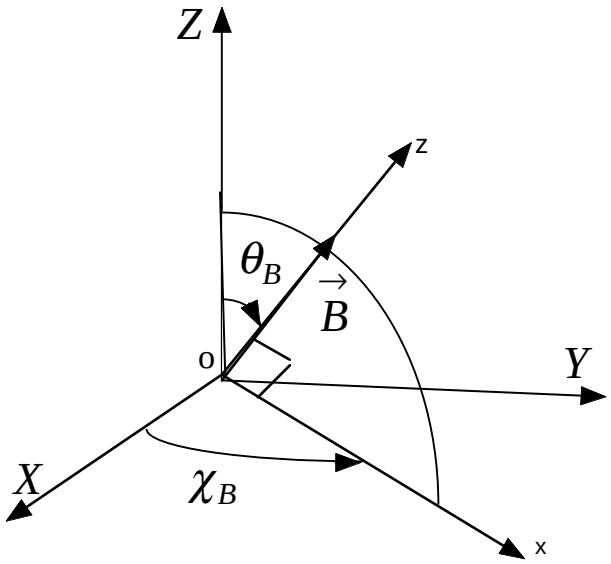

Figure 8.3: La direction du champ magnétique est spécifiée par χ_B et θ_B.

La contribution de ce champ magnétique $(\frac{d^{5\,1\,1}\rho^k_q}{dt})_{\text{magnétique}}$ dans l'équation pilote dépend de la base dans laquelle elle est écrite. D'abord nous avons écrit $(\frac{d^{5\,1\,1}\rho^k_q}{dt})_{\text{magnétique}}$ dans un repère

(xyz) où (oz) est dirigé le long d'un champ magnétique directif (Figure 8.3). Dans ce repère, le champ magnétique n'agit que sur les ${}^{5\,1\,1}\rho_q^k$ avec $q \neq 0$. De plus, le champ magnétique ne couple les populations et les cohérences en un point qu'aux populations et cohérences du même point[4]. Sa contribution dans les EES est:

$$\left(\frac{d^{5\,1\,1}\rho_q^k}{dt}\right)_{\text{magnétique}} = -2\,\pi\,i\,\nu_L\,g_{J'}\,q\,{}^{5\,1\,1}\rho_q^k. \tag{8.15}$$

$g_{J'}$ est le facteur de Landé du terme supérieur $5s5p\ {}^1P_1$. ν_L est la fréquence de Larmor qui est reliée au champ magnétique local B par: $\nu_L = e_0 B/4\pi mc$. e_0, m et c sont, respectivement, la valeur absolue de la charge de l'électron, la masse de l'électron et la vitesse de la lumière dans le vide.

Pour obtenir $(\frac{d^{5\,1\,1}\rho_q^k}{dt})_{\text{magnétique}}$ dans le cas général, on considère un nouveau repère (XYZ) qui n'est pas lié à la direction du champ magnétique (Figure 8.3). Dans ce nouveau repère la direction du champ magnétique est spécifiée par les angles θ_B et χ_B. La matrice densité dépend du référentiel dans lequel elle est exprimée. La nouvelle matrice densité $[{}^{5\,1\,1}\rho_q^k]_{XYZ}$ dans le référentiel (XYZ) est reliée à celle dans le repère (xyz) lié au champ magnétique par (cf Eq. (31) de Landi degl'Innocenti 1984):

$$[{}^{5\,1\,1}\rho_q^k]_{XYZ} = \sum_{q'} [{}^{5\,1\,1}\rho_{q'}^k]_{xyz} [\mathcal{D}_{q'q}^{(k)}]^*(R). \tag{8.16}$$

$R(0, -\theta_B, -\chi_B)$ est la rotation d'Euler pour passer du repère (xyz) au repère (XYZ), et $\mathcal{D}$ est l'opérateur de rotation.

De même que pour la matrice densité, le passage de l'ancien repère au nouveau transforme le tenseur de radiation $\bar{J}_q^k$ et on a:

$$[\bar{J}_q^k]_{XYZ} = \sum_{q'} [\bar{J}_{q'}^k]_{xyz} \mathcal{D}_{q'q}^{(k)}(R). \tag{8.17}$$

Puisque le rayonnement incident ne contient pas d'orientation (polarisation circulaire), les seules tenseurs de radiation intervenant dans les EES sont d'ordre $k = 0$ et $k = 2$. En effet les EES avec $k = 1$ ont pour solution triviale

$${}^{5\,1\,1}\rho_q^1 = 0. \tag{8.18}$$

La résolution analytique des EES concerne les éléments de la matrice densité ρ_q^k qui ne sont pas nuls: ${}^{5\,1\,1}\rho_0^0$, ${}^{5\,1\,1}\rho_0^2$, ${}^{5\,1\,1}\rho_{\pm1}^2$, ${}^{5\,1\,1}\rho_{\pm2}^2$. Les expressions intégrales, dans le cas d'un champ magnétique directif, de ces éléments sont données par Landi Degl'Innocenti et al. (1990).

Passage au cas d'un champ magnétique turbulent

Comme on l'a déjà mentionné, dans la photosphère solaire on s'attend à l'existence d'un champ magnétique turbulent, c'est-à-dire dont la direction varie d'un point à l'autre. Il faut alors moyenner les termes magnétiques des EES, écrites dans le repère (XYZ) non lié au

[4]Au contraire des termes des EES dépendant explicitement des paramètres de Stokes, qui couplent les différents points du milieu (via le transfert du rayonnement), l'effet du champ magnétique est local et ne dépend pas de l'histoire du rayonnement incident.

champ magnétique (Figure 8.3), sur toutes les directions équiprobables. Nous allons commencer par écrire les EES dans le repère (xyz):

$$[^{5\,1\,1}\rho^k_q]_{xyz}\ (D^k(5\ 1\ 1,T) + C_{10} + A_{10} + 2\ \pi\ i\ \nu_L\ g_{J'}\ q) =$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\ C_{01}\ [^{5\,0\,0}\rho^0_0]_{xyz}\ \delta_{q,0}\ \delta_{k,0} + B_{01}\ \frac{1}{\sqrt{3}}\ (-1)^q\ w^{(k)}_{10}\ [\bar{J}^k_{-q}(\nu_0)]_{xyz}\ [^{5\,0\,0}\rho^0_0]_{xyz} \tag{8.19}$$

Pour ce qui suit, nous prenons égale à l'unité la poulation $N(5s^2)$ du niveau inférieur de la transition, or pour un niveau nlJ:

$$^{n\,l\,J}\rho^0_0 = \frac{N(n\ l\ J)}{\sqrt{2J+1}} \tag{8.20}$$

et donc,

$$[^{5\,0\,0}\rho^0_0]_{xyz} = N(5s^2) = 1. \tag{8.21}$$

En divisant par $D^k(5\ 1\ 1,T) + C_{10} + A_{10}$, l'équation (8.19) devient,

$$\begin{aligned}[^{5\,1\,1}\rho^k_q]_{xyz}\ (1 + i\Gamma' q) &= \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{C_{01}}{A_{10}}\ \frac{A_{10}}{D^k(5\ 1\ 1,T) + C_{10} + A_{10}}\ \delta_{k,0}\ \delta_{q,0} \\ &+ \frac{c^2}{2\ h\ \nu_0^3}\ \sqrt{3}\frac{A_{10}}{D^k(5\ 1\ 1,T) + C_{10} + A_{10}}\ (-1)^q\ w^{(k)}_{10}\ [\bar{J}^k_{-q}(\nu_0)]_{xyz}\end{aligned} \tag{8.22}$$

Sachant que, Γ' est lié à la norme du champ magnétique microturbulent B par (équation (59) de Landi Degl'Innocenti 1990):

$$\begin{aligned}\Gamma' &= \frac{e_0\ B\ g_{J'}}{2\ m\ c\ (A_{10} + C_{01} + D^2(5\ 1\ 1,T))} \\ &= \frac{\Gamma}{1 + C_{01}/A_{10} + D^2(5\ 1\ 1,T)/A_{10}},\end{aligned} \tag{8.23}$$

Γ est la valeur du champ magnétique en unités relatives,

$$\Gamma = \frac{e_0\ B\ g_{J'}}{(2\ m\ c\ A_{10})}. \tag{8.24}$$

Si de plus, nous notons par

$$\epsilon' = \frac{C_{10}}{C_{10} + A_{10}}, \tag{8.25}$$

$$\delta^k = \frac{D^k(5\ 1\ 1,T)}{A_{10}}, \tag{8.26}$$

donc

$$\frac{1 - \epsilon'}{1 + \delta^k(1 - \epsilon')} = \frac{A_{10}}{D^k(5\ 1\ 1,T) + C_{10} + A_{10}}. \tag{8.27}$$

De plus,

$$\frac{B_{01}}{A_{10}} = 3\frac{c^2}{2\ h\ \nu_0^3}, \tag{8.28}$$

et l'équation (8.22) s'écrit,

$$[^{5\,1\,1}\rho^k_q]_{xyz}\ (1+i\Gamma' q)[1+\delta^k(1-\epsilon')]\frac{1}{\sqrt{3}}\,(\frac{2\ h\ \nu_0^3}{c^2}) \;=\; (1-\epsilon')w^{(k)}_{10}\ [\bar{J}^k_{-q}(\nu_0)]_{xyz}\ (-1)^q \quad (8.29)$$
$$+\frac{1}{3}(1-\epsilon')\ \frac{C_{01}}{A_{10}}\ (\frac{2\ h\ \nu_0^3}{c^2})\ \delta_{q,0}\ \delta_{k,0}.$$

Nous changeons l'indice q par q', nous multiplions cette équation par $[\mathcal{D}^{(k)}_{q'q}(R)]^* \times 1/(1+i\Gamma' q')$ et nous sommons sur q':

$$[1+\delta^k(1-\epsilon')]\ \frac{1}{\sqrt{3}}\ (\frac{2\ h\ \nu_0^3}{c^2})\sum_{q'}[^{5\,1\,1}\rho^k_{q'}]_{xyz}\ [\mathcal{D}^{(k)}_{q'q}(R)]^* \;=\; (1-\epsilon')\sum_{q'}\frac{1}{(1+i\Gamma' q')}w^{(k)}_{10}(-1)^{q'}$$
$$\times\ [\bar{J}^k_{-q'}(\nu_0)]_{xyz}\ [\mathcal{D}^{(k)}_{q'q}(R)]^* \quad (8.30)$$
$$+\frac{1}{3}(1-\epsilon')\frac{C_{01}}{A_{10}}\ (\frac{2\ h\ \nu_0^3}{c^2})\ \delta_{q,0}\ \delta_{k,0}$$

Or,

$$[\bar{J}^k_{-q'}]_{xyz} \;=\; \sum_{q''}[\bar{J}^k_{q''}]_{XYZ}\mathcal{D}^{(k)}_{q''-q'}(-R) = \sum_{q''}[\bar{J}^k_{-q''}]_{XYZ}\mathcal{D}^{(k)}_{-q''-q'}(-R) \quad (8.31)$$

en utilisant de plus l'équation (8.16), nous trouvons:

$$[1+\delta^k(1-\epsilon')]\frac{1}{\sqrt{3}}\ (\frac{2\ h\ \nu_0^3}{c^2})[^{5\,1\,1}\rho^k_q]_{XYZ} \;=\; (1-\epsilon')\sum_{q'}\frac{1}{(1+i\Gamma' q')}w^{(k)}_{10}(-1)^{q'}$$
$$\sum_{q''}[\bar{J}^k_{-q''}]_{XYZ}\mathcal{D}^{(k)}_{-q''-q'}(-R)\ [\mathcal{D}^{(k)}_{q'q}(R)]^* \quad (8.32)$$
$$+\frac{1}{3}(1-\epsilon')\frac{C_{01}}{A_{10}}\ (\frac{2\ h\ \nu_0^3}{c^2})\ \delta_{q,0}\ \delta_{k,0}.$$

Nous utilisons aussi l'identité (Messiah 1961),

$$\mathcal{D}^{(k)}_{-q''-q'}(-R) = (-1)^{q''-q'}[\mathcal{D}^{(k)}_{q''q'}(-R)]^* = (-1)^{q''-q'}\mathcal{D}^{(k)}_{q'q''}(R) \quad (8.33)$$

et le théorème de Weyl (Weyl 1939, Brink & Satchler 1962[5]),

$$\frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi} d\theta_B\ \int_0^{\pi}\sin\chi_B\ d\chi_B\mathcal{D}^{(k)}_{q'q''}(R)\ [\mathcal{D}^{(k)}_{q'q}(R)]^* = \delta_{q,q''}\ \frac{1}{2k+1}, \quad (8.34)$$

par conséquent la moyenne des EES sur les différentes orientations du vecteur champ magnétique, donne:

$$[1+\delta^k(1-\epsilon')]\frac{1}{\sqrt{3}}\ (\frac{2\ h\ \nu_0^3}{c^2})^{5\,1\,1}\rho^k_q \;=\; (1-\epsilon')\sum_{q'}\frac{1}{(1+i\Gamma' q')}w^{(k)}_{10}(-1)^{q'} \quad (8.35)$$
$$\times\ \sum_{q''}\bar{J}^k_{-q''}\delta_{q,q''}\ (-1)^{q''-q'}\ \frac{1}{2k+1}$$
$$+\ \frac{1}{3}(1-\epsilon')\frac{C_{01}}{A_{10}}\ (\frac{2\ h\ \nu_0^3}{c^2})\ \delta_{q,0}\ \delta_{k,0}$$

[5] Nous rappelons que nous avons adopté pour ce travail la même convention que ces auteurs, c'est à dire la convention de Messiah 1961.

Finalement les EES, dans le cas d'un champ magnétique turbulent, sont alors:

$$[1+\delta^k(1-\epsilon')](\frac{1}{3})^{\frac{1}{2}}\,(\frac{2\,h\,\nu_0^3}{c^2})^{5\,1\,1}\rho_q^k = (1-\epsilon')\mu^k w_{10}^{(k)}(-1)^q\,\bar{J}_{-q}^k + \frac{1}{3}(1-\epsilon')\frac{C_{01}}{A_{10}}\,(\frac{2\,h\,\nu_0^3}{c^2})\,\delta_{q,0}\,\delta_{k,0} \tag{8.36}$$

La seule différence entre cette dernière équation et l'équation (8.14), donnant les EES en absence du champ magnétique, est le facteur de Hanle,

$$\mu^k = \frac{1}{2k+1}\sum_{q'=-k}^{k}\frac{1}{(1+\mathrm{i}\Gamma' q')}. \tag{8.37}$$

Le facteur de Hanle dépend de l'ordre tensoriel k, en particulier,

$$\mu^0 = 1 \tag{8.38}$$

et,

$$\mu^2 = \frac{1}{5}[\frac{1}{1-2\mathrm{i}(\Gamma')}+\frac{1}{1-\mathrm{i}(\Gamma')}+1+\frac{1}{1+\mathrm{i}(\Gamma')}\frac{1}{1+2\mathrm{i}(\Gamma')}] \tag{8.39}$$

$$= \frac{1}{5}[1+\frac{2}{1+(\Gamma')^2}+\frac{2}{1+4(\Gamma')^2}]. \tag{8.40}$$

Dans le cas d'un champ magnétique turbulent:

- seuls les éléments ${}^{5\,1\,1}\rho_0^0$ et ${}^{5\,1\,1}\rho_0^2$ sont différents de zéro, si l'axe (OZ) est la verticale de l'atmosphère
- ${}^{5\,1\,1}\rho_0^0$ vérifie la même équation que $({}^{5\,1\,1}\rho_0^0)_{\text{non-magnétique}}$
- ${}^{5\,1\,1}\rho_0^2$ est l'inconnue de la même équation que celle vérifiée par $({}^{5\,1\,1}\rho_2^0)_{\text{non-magnétique}}$ sauf que nous multiplions le premier terme de cette équation (i.e. équation 8.14) par μ^2.

8.4 Méthode d'analyse et résultats

8.4.1 Profondeur optique de la raie et modèle d'atmosphère

La solution numérique des équations intégrales donnant les éléments de la matrice densité nécessite la détermination du coefficient d'absorption du continu c'est-à-dire dans un domaine du spectre où il n'y a pas de raie spectrale. Ce coefficient est évalué selon la méthode proposée par Landi Degl'Innocenti et al. (1976) (code MALIP). L'absorption est due aux processus physiques de type H^- libre-libre (Gingerich et al. 1967) et H^- libre-lié (Gingerich et al. 1967) et on tient compte également de l'absorption due à l'hydrogène neutre étant donné son abondance dans l'atmosphère solaire. On ajoute aussi à l'absorption totale la contribution de la diffusion de Thompson sur les électrons (Dalgarno 1962b) et la diffusion Rayleigh sur les atomes d'hydrogène (Dalgarno & Williams 1962). Pour calculer l'absorption au centre de la raie les données atomiques sont celles de Allen (1973).

L'abondance N_{Sr} du SrI est supposée égale à 2.93 (i.e. $\mathrm{Log}(N_{Sr}/N_H)$ +12= 2.93) et pour calculer ensuite les abondances de SrII et SrIII, on suppose l'ETL pour modéliser l'équilibre d'ionisation du strontium et en appliquant la loi de Saha. Un écart à l'équilibre est simulé pour les hauteurs au-dessus de $\tau_{5000} = 0.1$. En effet pour ces hauteurs la loi de Saha est appliquée

mais pour "une température de rayonnement", différente de celle du gaz (des électrons) donnée par le modèle d'atmosphère. Cette température de rayonnement est prise constante et égale à 5100 K.

La hauteur de formation du centre de la raie est celle qui correspond à $\tau/\mu = 1$ (approximation d'Eddington-Barbier, voir chapitre 2). Ces hauteurs h, en km, sont données dans la Table 8.1. La température de formation de la raie à cette hauteur est utilisée pour calculer l'élargissement Doppler (section suivante).

8.4.2 Les vitesses microturbulente et macroturbulente

Les vitesses microturbulente et macroturbulente doivent être introduites dans le modèle de formation de la raie polarisée pour prendre en compte les mouvements non-thermiques. Les mouvements de microturbulence correspondent aux mouvements dont les vitesses varient sur des échelles inférieures au libre parcours moyen (l.p.m.) du photon (typiquement égal à 300 km pour la raie SrI 4607 Å, Faurobert-Scholl 1993). La vitesse de l'atome rayonnant varie entre une émission d'un photon par un atome et son absorption par un autre atome. Il faut donc introduire une vitesse de microturbulence $v_{\rm micro}$ dans l'élargissement Doppler $\Delta\nu_D$,

$$\Delta\nu_D = \frac{\nu_0}{c}\sqrt{\frac{2k_BT_F}{M} + v_{\rm micro}^2}, \tag{8.41}$$

où M= 87.62 u.m.a. est la masse du strontium et T_F est la température de formation de la raie. Nous notons que $\Delta\nu_D$ est supposé indépendant l'épaisseur optique τ.

La vitesse macroturbulente est liée au mouvement non résolu des grandes structures granulaires, l'échelle de variation de la vitesse macroturbulente est plus grande que le l.p.m. du photon. Entre une émission et une absorption, la vitesse macroturbulente $v_{\rm macro}$ n'a pas varié: cette vitesse ne contribue donc pas à l'élargissement Doppler. On tient compte du fait qu'on ne peut pas résoudre la vitesse à grande échelle, par une convolution des profils théoriques des paramètres de Stokes (Q et I), avec une Gaussienne

$$\frac{1}{x\sqrt{\pi}}\exp\{-(\frac{\nu-\nu_0}{x\Delta\nu_D})^2\}, \tag{8.42}$$

avec

$$x = \frac{v_{\rm macro}}{\sqrt{\frac{2k_BT}{M} + v_{\rm micro}^2}}. \tag{8.43}$$

8.4.3 Ajustements des profils et résultats

Pour déterminer les vitesses microturbulente $v_{\rm micro}$ et macroturbulente $v_{\rm macro}$, on peut superposer les profils des intensités théoriques, obtenus dans l'hypothèse d'une atmosphère non-magnétisée, et ceux observés. En effet, avec une très bonne approximation on peut supposer que le profil de $I/I_{\rm continuum}$ ne dépend pas du champ magnétique, $I_{\rm continuum}$ est l'intensité du continuum au voisinage de la raie d'absorption 4607 Å du SrI.
À chaque distance μ par rapport au soleil, nous avons ajusté le profil théorique de $I/I_{\rm continuum}$ sur le profil observé dans un intervalle de longueur d'onde $\Delta\lambda$ environ deux fois plus grand que la largeur du profil observé. Le meilleur ajustement fournit les valeurs des vitesses microturbulente et macroturbulente.
Étant donné que:

μ	d (arcsec)	h (Km)	v_{micro}	v_{macro}
0.09130	4	327	1.8	2.3
0.14437	10	300	1.9	2.3
0.20416	20	279	1.85	2.4
0.28873	40	259	1.8	2.35
0.40833	80	240	1.7	2.45
0.57746	160	221	1.55	2.42

Table 8.1: Valeurs des vitesses microturbulente et macroturbulente en km s^{-1} pour 6 distances au limbe solaire.

μ	d (arcsec)	$B_{7/12}$	$B_{8/12}$	$B_{9/12}$	v_{micro}	v_{macro}
0.09130	4	41	42	-	1.8	2.3
0.14437	10	43	52	-	1.9	2.3
0.20416	20	-	35	45	1.85	2.4
0.28873	40	-	-	50	1.8	2.35
0.40833	80	-	-	54	1.7	2.45
0.57746	160	-	-	52	1.55	2.42

Table 8.2: $B_{7/12}$, $B_{8/12}$ et $B_{9/12}$ correspondent à des valeurs des champs magnétiques, en Gauss, calculées à partir des observations du 7, 8, et 9 Décembre respectivement. Ces valeurs sont données pour 6 distances au limbe solaire et pour ($v_{\rm micro}$, $v_{\rm macro}$) de la Table 8.1.

– la vitesse microturbulente influe surtout sur l'élargissement (équation 8.41) et, de façon beaucoup moins sensible, sur la hauteur de profil (équation 8.42),

– la vitesse macroturbulente agit surtout sur la hauteur du profil (équation 8.42). Si la hauteur change, la largeur change aussi mais très peu: la vitesse macroturbulente agit aussi sur la largeur mais d'une manière très peu importante.

Pour converger vers le profil observé en partant du profil théorique, nous avons joué sur les valeurs de $v_{\rm micro}$ ou $v_{\rm macro}$ à chaque fois. Dans un premier temps nous essayons d'ajuster l'élargissement en jouant sur $v_{\rm micro}$, puis nous essayons d'ajuster la hauteur en jouant sur $v_{\rm macro}$, etc.... La convergence est obtenue pour un couple unique ($v_{\rm micro}$, $v_{\rm macro}$). La Table 8.1 présente les valeurs de ces deux vitesses qui donnent le meilleur ajustement entre le profil d'intensité théorique et le profil observé à différentes distances. La superposition de ces deux profils est présentée sur la Figure 8.4 pour les observations des 7 et 9 Décembre 2002.

À chaque distance μ par rapport au soleil, en utilisant les valeurs de ($v_{\rm micro}$, $v_{\rm macro}$) données par la Table 8.1, nous injectons une valeur du champ magnétique turbulent dans le code de résolution des équations couplées de transfert de rayonnement polarisé et d'équilibre statistique.

À ce stade, le code utilisé (Bommier et al. 1991) prend en compte les processus

– collisionnels via les taux $D^2(5\ 1\ 1, T)$ et C_{01} (ces taux sont calculés en fonction de la profondeur dans l'atmosphère),

– radiatifs en tenant compte de l'émission spontanée (A_{10}) et de l'absorption (B_{01}),

– magnétiques en introduisant, à chaque fois que le code tourne, une valeur du champ magnétique.

Nous avons fait varier le champ magnétique introduit dans les EES de façon à converger vers la valeur de la polarisation observée. Nous retenons les valeurs du champ magnétique qui donnent,

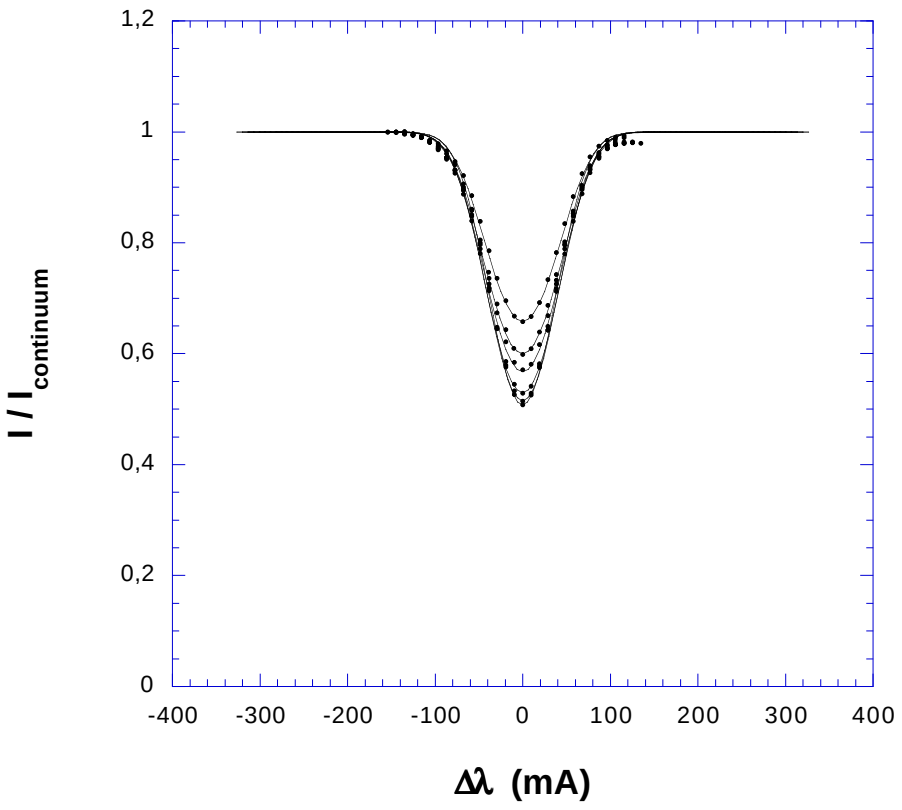

Figure 8.4: Superposition des profils d'intensité théoriques (pointillé) et observés (ligne continue), de la raie SrI 460.73 nm, à 6 distances comptées vers l'intérieur du limbe solaire: d = 4, 10, 20, 40, 80 et 160 arcsec respectivement. Les profils des intensités théoriques correspondent à ($v_{\rm micro}$, $v_{\rm macro}$) de la Table 8.1.

à chaque distance, une valeur de polarisation théorique au centre de la raie pratiquement égale à la valeur observée. Notons que lors de l'ajustement de la polarisation linéaire au centre de la raie, nous ne faisons aucun ajustement sur la largeur[6]. Les profils de la polarisation linéaire calculée et mesurée sont reportés sur la Figure 8.5.

La Figure 8.5 présente les points de mesure des taux de polarisation (après avoir soustrait la polarisation du continu) ainsi que la valeur du champ magnétique turbulent correspondant, en fonction de la distance par rapport au bord du soleil. Sur la même courbe (Figure 8.5) nous avons présenté aussi, en ligne continue, une fonction moyenne qui fitte les taux de polarisation mesurés,

$$p \;=\; 0.01507 \exp\{-3.84\mu\}. \tag{8.44}$$

Le champ magnétique B et les vitesses de turbulence $v_{\rm micro}$ et $v_{\rm macro}$ varient peu en fonction de la distance par rapport au bord. La moyenne de ces quantités, sur la distance au limbe du soleil μ, donne une valeur moyenne de $B = 46$ Gauss pour des vitesses moyennes $v_{\rm micro} = 1.8$ km s^{-1} et $v_{\rm macro} = 2.4$ km s^{-1}.

[6] $v_{\rm micro}$ et $v_{\rm macro}$ utilisées sont celles de la Table 8.1, déterminées en supposant le champ magnétique nul

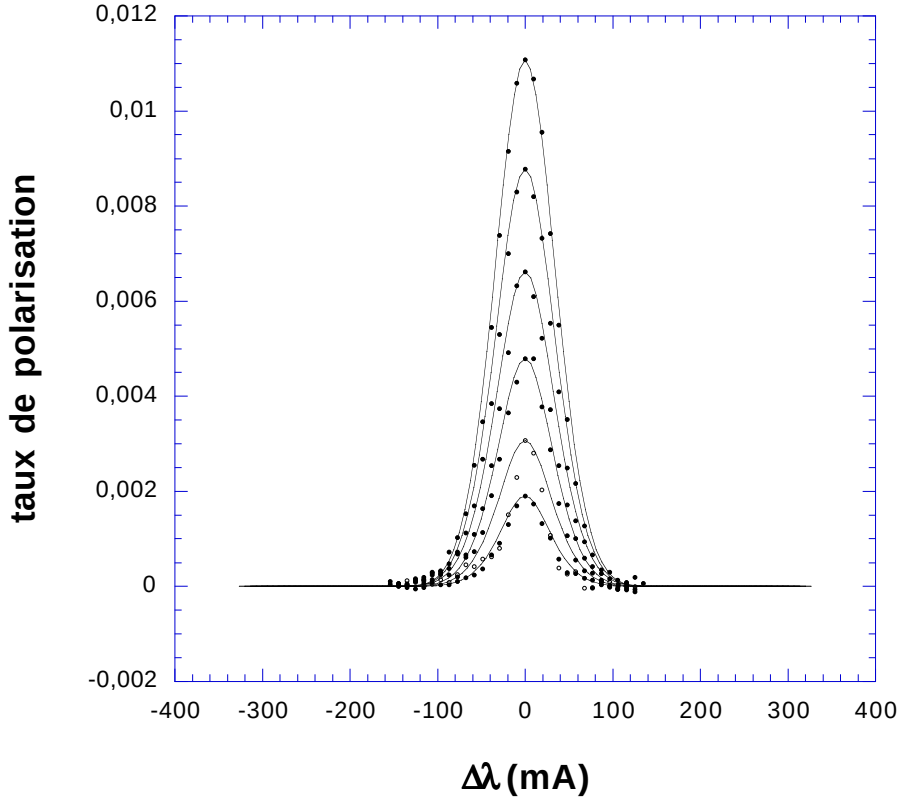

Figure 8.5: Superposition des profils de Q/I théoriques (pointillé) et observés (continu), de la raie SrI 4607 Å, à 6 distances du limbe solaire: d = 4, 10, 20, 40, 80 et 160 arcsec respectivement. Ces profils sont obtenus, en utilisant ($v_{\rm micro}$, $v_{\rm macro}$) de la Table 8.1, en ajustant la polarisation du centre de la raie par rapport à celle observée.

8.5 Discussions

8.5.1 Effet des vitesses micro et macroturbulentes

Nous avons obtenu des champs magnétiques de 35 à 54 Gauss pour des distances entre 4 et 160 arcsec. Faurobert et al. (2001) ont trouvé des valeurs de champ magnétique de 20 à 30 Gauss pour des distances entre 1.3 et 96 arcsec. Nos valeurs sont donc pratiquement deux fois plus grandes. Le formalisme adopté ici était développé pour un atome à deux niveaux dont le niveau fondamental est non polarisé par Landi Degl'Innocenti et al (1990), il est équivalent à celui utilisé par Faurobert et al. (2001). La principale différence avec Faurobert et al. (2001) concerne les valeurs des vitesses de microturbulence:

– les vitesses de macroturbulence déterminées ici pour chaque distance sont égales à 2.4 km s^{-1} en moyenne (Table 8.1). Faurobert et al. (2001) ont utilisé, pour toutes les distances, une même vitesse macroturbulente égale à 2.5 km s^{-1}, qui est bien proche de notre vitesse moyenne de macroturbulence,

– tandis que nos vitesses de microturbulence (Table 8.1), dont la moyenne est égale à 1.8 km s^{-1}, sont presque deux fois celle utilisée par Faurobert et al. (2001) qui est égale à 1 km s^{-1}.

La détermination du champ magnétique est très sensible à celle de la vitesse microturbulente. Pour montrer ce résultat il suffit de re-calculer maintenant un champ magnétique avec $v_{\rm micro}$ = 1 km s^{-1} et $v_{\rm macro}$ = 2.5 km s^{-1} pour toutes les distances μ, ce sont ces valeurs

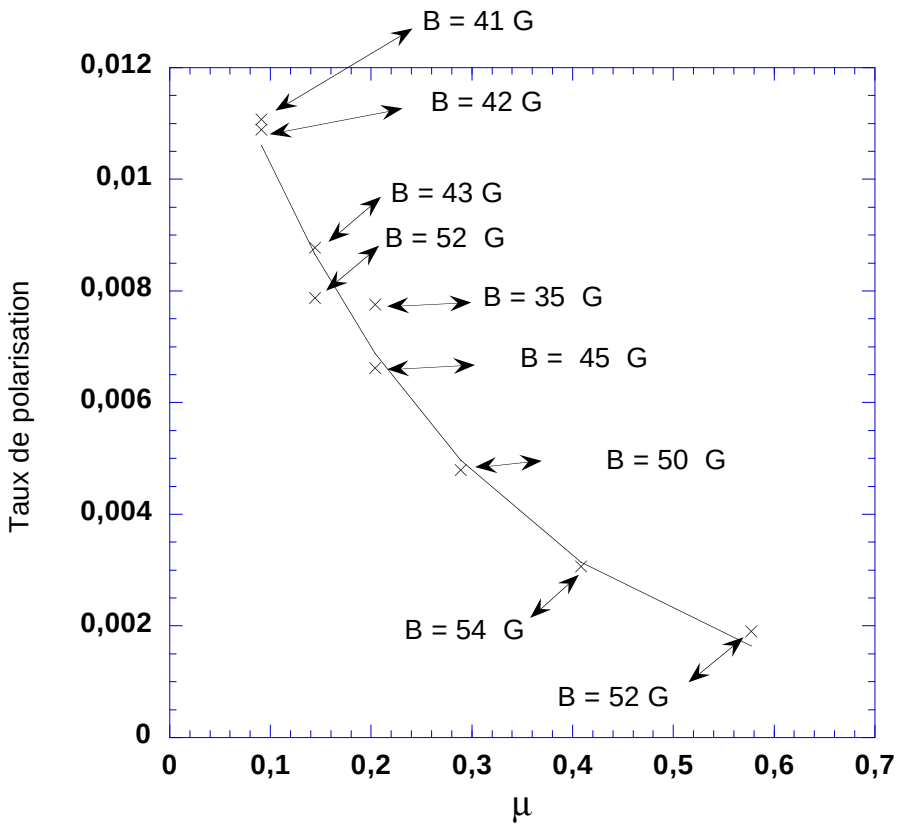

Figure 8.6: Variation du taux de polarisation au centre de la raie en fonction de la distance μ par rapport au limbe. Pour différentes valeurs de μ et pour les vitesses de turbulence à ces distances, la meilleur ajustement de la polarisation au centre de la raie correspond à la valeur appropriée du champ magnétique B en Gauss (voir aussi Table 8.1). $\times$: Mesures de polarisation obtenues avec THEMIS les 7, 8, et 9 Decembre 2002 par V. Bommier et G. Molodij; ligne continue: une fonction moyenne qui fitte les taux polarisation mesurés.

qui étaient utilisé par Faurobert et al. (2001). Dans ces conditions les valeurs des champs magnétiques sont obtenues entre 14 et 28 Gauss (Table 8.3). La valeur moyenne est de 23 Gauss, soit la moitié de celle que nous avons trouvé en utilisant nos vitesses de turbulence (Table 8.1). Cette moyenne de 23 Gauss est en accord avec les déterminations de Faurobert et al. (2001) qui ont trouvé des champs entre 23 et 30 Gauss. Pour augmenter la précision sur les valeurs de champ magnétique turbulent il faut commencer par bien déterminer les vitesses de turbulence.

Nous signalons que le modèle adopté pour modéliser l'équilibre d'ionisation de l'atome de strontium est peut être la source principale d'incertitude. En effet, à titre indicatif, nous avons calculé un champ magnétique en utilisant un modèle en ETL (loi de Saha), nous avons obtenu des champs magnétiques environ cinq fois plus grands que ceux de la Table 8.2 (voir aussi Figure 8.6). Les valeurs de la Table 8.2, que nous recommandons, sont obtenues en utilisant la simulation de l'écart à l'ETL que nous avons décrite en section 8.4.1. Il faut remarquer cependant que Faurobert et al. (2001) utilisent un équilibre d'ionisation très proche de celui de notre modèle (cf Table 1 Faurobert-Scholl, 1993).
Trujillo Bueno & Shchukina (à paraître) ont utilisé un modèle d'atome multiniveaux (15

μ	d (arcsec)	$B_{7/12}$	$B_{8/12}$	$B_{9/12}$
0.09130	4	23	24	-
0.14437	10	21	26	-
0.20416	20	-	14	23
0.28873	40	-	-	24
0.40833	80	-	-	28
0.57746	160	-	-	28

Table 8.3: $B_{7/12}$, $B_{8/12}$ et $B_{9/12}$ correspondent des valeurs des champs magnétiques, en Gauss, calculés à partir des observations du 7, 8, et 9 Décembre respectivement. Ces valeurs sont données à 6 distances du limbe solaire et pour ($v_{\rm micro} = 1$ km s^{-1}, $v_{\rm macro} = 2.5$ km s^{-1}). Ces valeurs sont très sensibles à celles des vitesses de turbulence (comparer avec les champs magnétiques, que nous recommandons, de la Table 8.2).

niveaux) (rappellons que nous avons utilisé un modèle à deux niveaux) et un modèle d'atmosphère à 3 dimensions obtenu par une simulation magnéto-convective de l'atmosphère solaire, ce qui permet de s'affranchir des paramètres ad-hoc $v_{\rm micro}$ et $v_{\rm macro}$ (nous avons adopté un cas d'atmosphère unidimensionnel et introduit des paramètres ad-hoc $v_{\rm micro}$ et $v_{\rm macro}$). Ces deux auteurs ont déterminé un champ magnétique moyen de 60 Gauss. Ce résultat, obtenu à partir d'un modèle plus complet, n'est pas très différent de notre champ magnétique moyen de 46 Gauss.

8.5.2 Effet de l'incertitude sur le taux de dépolarisation collisionnlle

Finalement, nous avons étudié l'effet de l'incertitude sur le taux de dépolarisation $D^2(5\ 1\ 1, T)$ sur les valeurs des champs magnétiques. Pour cela, nous avons remplacé à chaque fois la valeur de référence $D^2(5\ 1\ 1, T)$ (équation 8.2), par une valeur arbitraire $D^2(5\ 1\ 1, T)_{\rm test}$ et on calcule le champ magnétique $B_{\rm test}$ correspondant. Le résultat de ce test est présenté dans la Table 8.4, par exemple une multiplication par 2 de $D^2(5\ 1\ 1, T)$ (i.e. $D^2(5\ 1\ 1, T)_{\rm test}/D^2(5\ 1\ 1, T)$=2) induit une diminution de 30 % du champ magnétique ($B_{\rm test}/B$=0.7).
Une erreur relative inférieure à 20 % est attendue sur les taux de dépolarisation obtenus par notre méthode semi-classique de calcul des taux de dépolarisation (Derouich et al. 2003a, 2003b, 2003c et les références en relation; voir aussi chapitres 4, 5 et 6). Cela correspondent à une erreur de 6 % sur les champs magnétiques; en effet, $D^2(5\ 1\ 1, T)_{\rm test}/D^2(5\ 1\ 1, T) = 0.8$ et 1.2 correspond à $B_{\rm test}/B = 1.06$ et 0.94 respectivement (Table 8.4).

D'après ce test, la précision relative sur le champ magnétique est supérieure à la précision sur le taux de dépolarisation. Pour essayer de comprendre et généraliser ce résultat, il suffit de tenir compte du fait que $p = Q/I$ doit rester constant lors du test. Ceci revient à dire que ${}^{5\,1\,1}\rho_0^2$ donné par l'équation (8.36) est constant et donc,

$$\mu^2 \;=\; \text{constante}, \tag{8.45}$$

bien sûr le facteur de Hanle μ^2 est constant si,

$$\begin{aligned} \Gamma' &= \frac{e_0\, B}{2\, m\, c\, (A_{10} + C_{01} + D^2(5\ 1\ 1, T))} \\ &= \text{constante}, \end{aligned} \tag{8.46}$$

$D^2(5\ 1\ 1,T)_{\rm test}/D^2(5\ 1\ 1,T)$	$B_{\rm test}/B$
0.10	1.53
0.30	1.29
0.50	1.18
0.70	1.10
0.80	1.06
0.90	1.03
1.00	1.00
1.20	0.94
1.40	0.88
1.60	0.82
1.80	0.76
2.00	0.70
2.50	0.54
3.00	0.35
3.20	0.25

Table 8.4: Test de l'influence de la variation du taux de dépolarisation sur le champ magnétique. Les rapports $B_{\rm test}/B$ sont donnés en analysant l'observation de 7 Décembre pour $d = 4$ arcsec.

ce qui implique,

$$\frac{B}{(A_{10} + C_{01} + D^2(5\ 1\ 1,T))} = \text{constante}, \tag{8.47}$$

et ainsi en dérivant cette équation,

$$|\frac{\delta B}{B}| = |\frac{\delta D^2(5\ 1\ 1,T)}{D^2(5\ 1\ 1,T)}| \times \frac{D^2(5\ 1\ 1,T)}{D^2(5\ 1\ 1,T) + A_{10} + C_{01}} < |\frac{\delta D^2(5\ 1\ 1,T)}{D^2(5\ 1\ 1,T)}|. \tag{8.48}$$

Les différentielles δB et δD^2 sont de signe opposée car l'effet Hanle et les collisions isotropes avec l'hydrogène neutre sont deux effets dépolarisants: dans le cas où tous les autres effets sont fixés, si on sous-estime l'un on sur-estime l'autre. Ce résultat montre qu'une erreur relative $\delta D^2(5\ 1\ 1,T)/D^2(5\ 1\ 1,T)$ induit une erreur relative $\delta B/B$ plus petite, ce qui est en accord avec la Table 8.4. L'équation (8.48) constitue un résultat général dans le cadre des hypothèses suivantes:

- un atome à deux niveaux
- prise en compte des processus radiatifs et collisionnels en modélisant la formation de la raie en présence d'un champ magnétique turbulent
- émission induite négligeable
- le niveau inférieur n'est pas aligné (non polarisé); ce cas se produit si le moment total $J = 0$ ou $J = 1/2$ ou encore si l'alignement est complètement détruit par un processus dépolarisant.

Lorsque nous avons introduit notre méthode semi-classique de calcul des taux de dépolarisation, nous avons mentionné les raisons quant à son interêt pour la contribution à l'interprétation du second spectre du soleil. L'équation (8.48) ajoute une raison de plus. L'erreur qui peut être introduite à cause de l'utilisation de nos taux de dépolarisation entre bien dans la barre d'erreur attendue sur les valeurs du champ magnétique.

8.6 Conclusion

Dans ce chapitre, notre objectif était l'interprétation des observations de la polarisation linéaire de la raie SrI 4607 Å en terme de champ magnétique. Pour atteindre cet objectif, nous avons modélisé la formation de la raie polarisée en présence d'un champ magnétique turbulent selon le formalisme développé par Landi Degl'Innocenti et al. (1990). Les taux de dépolarisation, calculés par notre méthode semi-classique, sont prise en compte dans cette modélisation. Cette étude nous a permis de

- montrer que les taux de dépolarisation collisionnels doivent impérativement être pris en compte pour ne pas surestimer les valeurs du champ magnétique.
- montrer qu'une précision de 20 % sur les taux de dépolarisation est largement suffisante pour les objectifs astrophysiques actules de détermination de champ magnétique.
- mettre en évidence l'importance des vitesses micro et macroturbulentes pour la détermination de champ magnétique.

Chapitre 9

Conclusions et perspectives

9.1 Conclusions

1. Dans ce travail nous avons tout d'abord donné un aperçu général sur le second spectre solaire et rappelé les notions relatives aux phénomènes de la polarisation de la lumière, de l'assombrissement centre-bord et de l'effet Hanle.

2. Dans cette thèse nous avons développé une nouvelle méthode semi-classique pour le calcul de la dépolarisation collisionnelle des raies par collisions avec les atomes d'hydrogène. Elle s'inspire de la méthode ABO développée dans les années 90 par Anstee, Barklem et O'Mara pour l'élargissement des raies.

   Nous avons appliqué notre méthode au calcul des sections efficaces de dépolarisation et de transfert de polarisation, pour des intervalles de nombres quantiques principaux effectifs n^* couvrant la majorité des raies intéressant le second spectre solaire. Les résultats sont donnés sous forme de tableaux de valeurs de sections efficaces en fonction de n^*, pour une vitesse typique de 10 km s^{-1} (correspondant à une température de 4500K). Les intervalles des valeurs de n^* dépendent du moment orbital de l'électron de valence l, en effet: pour $l = 1$, $1.5 \leq n^* \leq 3.0$, pour $l = 2$, $2.5 \leq n^* \leq 4.0$ et pour $l = 3$, $3.3 \leq n^* \leq 5.0$, le pas de variation de n^* étant de 0.1. Nous avons ensuite calculé les taux de dépolarisation en effectuant une moyenne sur une distribution de Maxwell des vitesses. Ces taux sont présentés, en fonction de la température et de n^*, sous la forme de grilles à trois dimensions. Ces grilles constituent une vraie "base de données". De plus, ces résultats donnés en fonction de n^* et T, peuvent être interpolés ou extrapolés aux valeurs de n^* et T qui correspondent à la raie étudiée ainsi qu'au modèle de sa formation.

3. Nous avons traité, avec notre méthode générale, des cas particuliers qui ont aussi été traités par une méthode de chimie quantique. Cela nous a permis de valider notre approche semi-classique: nous pourrons considérer que l'erreur sur les taux de dépolarisation est inférieure à 20 %, à l'exception du strontium pour lequel nous avons obtenu une différence de 20–30 % par rapport à des taux qui auraient été calculés avec un potentiel "hybride" qui décrirait aux mieux l'interaction du strontium neutre avec l'hydrogène (voir section 6.5). Nous avons discuté ce résultat en étudiant la sensibilité des taux de dépolarisation aux différentes régions du potentiel d'interaction. Nous avons montré que la région intermédiaire des distances interatomiques, bien décrite par notre approche, joue un rôle déterminant pour l'évaluation des taux de dépolarisation.

4. Nous avons ensuite étendu notre méthode au cas des atomes une fois ionisés. La différence entre l'application de notre méthode dans le cas des atomes et dans le cas des ions concerne la valeur de l'énergie moyenne d'Unsöld E_p. Pour les atomes neutres E_p est prise égale à -4/9 u.a. alors que pour les ions E_p doit être calculé au cas par cas (i.e. pour chaque état d'un ion donné). Par conséquent, un ingrédient de plus, par rapport aux cas des atomes neutres, doit être introduit dans notre code pour calculer les taux de dépolarisation.

Nous avons testé l'impact de la précision des valeurs de E_p sur les taux de dépolarisation et nous avons montré que généralement ces taux sont suffisamment stables vis à vis d'une variation de E_p (section 7.7.2).

Comme pour le cas des atomes nous avons comparé nos résultats à ceux de la chimie quantique. Cette comparaison montre une différence inférieure à 15 % pour le CaII, ce qui constitue un résultat très encourageant. Nous avons appliqué notre méthode générale pour calculer les taux de dépolarisation des états associés à la raie SrII 4078 Å. Cette raie, qui présente une polarisation linéaire importante, a été étudiée par Bianda et al. (1998); ces auteurs ont utilisé des taux de dépolarisation calculés par la méthode de Van der Waals.

5. Enfin, nous avons analysé des observations de la polarisation linéaire de la raie SrI 4607 Å, effectuées à THEMIS au pôle nord du soleil, en terme de champ magnétique. Nous avons introduit les taux de dépolarisation calculés par notre méthode dans le code associé au formalisme développé, par Landi Degl'Innocenti et al. 1990, pour un atome à deux niveaux dont le niveau fondamental est totalement dépolarisé. Nous avons montrer qu'une interprétation quantitative de la polarisation pour détermination de champ magnétique doit inclure les taux de dépolarisation collisionnels calculés avec une précision raisonnable. Nous avons estimé l'erreur qui peut être introduite par l'utilisation de notre méthode de calcul de taux de dépolarisation: nous avons conclu que cette erreur entre bien dans la barre d'erreur attendue sur les valeurs du champ magnétique. Nous avons montré que la détermination du champ magnétique est très sensible aux valeurs des vitesses micro et macroturbulente. Nous avons trouvé un champ magnétique moyen de 46 Gauss pour des vitesses moyennes de turbulence $v_{\rm micro} = 1.8$ km s^{-1} et $v_{\rm macro} = 2.4$ km s^{-1}.

9.2 Perspectives

1. Le second spectre solaire contient une majorité de raies d'atomes lourds (12.7 % de raies de TiI, 37.8 % de FeI, ...). Une étude complète de ce spectre passe nécessairement par l'interprétation des taux de polarisation associés à ces atomes lourds. Cette analyse nécessite, entre autres, l'introduction de l'effet des collisions dépolarisantes avec les atomes neutres de l'hydrogène. Le calcul des taux de dépolarisation des états des atomes lourds sont inaccessibles actuellement à une approche quantique standard. Pour que le traitement par notre méthode soit possible, il suffit que dans la configuration électronique de l'état de l'atome perturbée, la sous-couche externe (nl^k) ne contienne qu'un seul électron équivalent[1], i.e. $k = 1$ et que l'on ait aussi $l \leq 3$. En faisant l'hypothèse du "coeur gelé", ce qui est déjà le cas dans la théorie ABO adopté ici, qui consiste à supposer que les électrons du coeur représentés de façon standard par un spin total S_C et un moment orbital L_C fixes pendant la collision, notre méthode peut être généralisée aux atomes complexes avec un simple calcul d'algèbre angulaire. Cette condition est vérifiée dans un grand nombre de cas: par exemple, d'après les données de NIST (2003) cette condition est vérifiée pour toutes les raies de Ti I.

   Voici un exemple: pour la raie de FeI $\lambda = 5369.96$ Å, les configurations électroniques de l'état inférieur et de l'état supérieur sont: $3d^7\ (^4F)\ 4p\ ^5G$ et $3d^7\ (^4F)\ 4d\ ^5H$, les deux

[1]Pour rendre possible le calcul des taux de dépolarisation dans le cas où $k \geq 2$, il faut tenir compte de la présence des k électrons optiques dans le calcul du potentiel d'interaction. Ce calcul, beaucoup plus complexe, pourra se faire par la suite.

termes spectraux de la transition sont: ^5G (L=4 et S=2) et ^5H (L=5 et S=2). Suivant le modèle ABO, adopté ici, les 7 électrons de la couche $3d$ ne sont pas affectés par la collision. L'état de ces électrons est conservé au cours de la collision. Le coeur ^4F est telque $S_C = 3/2$ et $L_C = 3$ sont conservés, les éléments de la matrice de diffusion S sont diagonaux en L_C et indépendants de S_C. Les éléments de la matrice S entre sous-niveaux J correspondant au terme ^5G (ou ^5H) sont des combinaisons linéaires des éléments de matrice calculés pour les niveaux $4p$ (ou $4d$) avec notre code actuel.

2. Nous pensons à étendre notre méthode de calcul des taux de dépolarisation par collisions avec les atomes neutres de l'hydrogène aux collisions avec les protons. Ceci permettrait d'améliorer les calculs semi-classiques utilisés actuellement pour interpréter la polarisation linéaire des raies de l'hydrogène des protéburances et des éruptions.

3. La méthode semi-classique développée dans cette thèse est capable de fournir les taux de dépolarisation et de transfert de polarisation pour un grand nombre de raies du second spectre solaire. Nous envisageons de regrouper ces taux dans une base de données pour les mettre à la disposition des astrophysiciens solaires[2].

4. Comme nous l'avons déjà mentionné, la détermination du champ magnétique dépend fortement des vitesses micro et macroturbulentes. Nous avons déterminé ces dernières par ajustement manuel des profils d'intensité théorique en champ nul avec les profils observés. Cet ajustement manuel limite sans aucun doute le nombre d'observations que nous pouvons traiter. Nous réfléchissons à l'automatisation de l'ajustement théorie/observations pour dépouiller un grand nombre d'observations (par exemple, celles du Pic-du-Midi de Sr I 4607 Å, obtenues avec une fente perpendiculaire au bord). Cela nous permettra de mieux comprendre la variation du champ magnétique avec la profondeur.

[2] Anstee, Barklem & O'Mara ont mis leurs calculs des élargissement des raies, d'un grand nombre de raies fortes d'étoile froides, dans la base de donnée VALD (the Vienna Atomic Line Database) (Barklem et al. 2000a).

Annexe A

Interaction à longue portée

On considère deux atomes neutres assimilés à deux distributions de charge dans une région limitée de l'espace: q_i en $(x_i,\, y_i,\, z_i)$ et q_j en $(x_j,\, y_j,\, z_j)$. La charge totale de chacune des deux distributions est

$$\sum_i q_i = \sum_j q_j = 0 \tag{A.1}$$

Aux grandes distances, pour deux atomes neutres, l'interaction dipôle induit–dipôle induit est dominante. Le potentiel d'interaction V est donné par:

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{R^3}\sum_{ij} q_i q_j (x_i x_j + y_i y_j - 2 z_i z_j) \\ &= \frac{1}{R^3}\sum_{ij} q_i q_j (\vec{r_i}\vec{r_j} - \frac{3(\vec{r_i}.\vec{R})(\vec{r_j}.\vec{R})}{R^2}), \end{aligned} \tag{A.2}$$

où $\vec{r_i}= (x_i,\, y_i,\, z_i)$, $\vec{r_j}= (x_j,\, y_j,\, z_j)$ et R est la distance interatomique le long de l'axe (oz) (i.e. $\vec{R} = (0, 0, R)$).

Pour calculer le potentiel d'interaction, on applique la théorie des perturbations indépendantes du temps à l'ordre deux. Aux grandes distances (R très grand) le recouvrement entre les nuages électroniques des deux atomes diminue comme $\exp(-R)$. Pour deux atomes non identiques, lorsque le recouvrement est négligeable, la valeur de l'interaction au premier ordre de perturbations est négligeable devant le terme au second ordre (Margenau & Kestner p. 36). L'interaction est alors donnée par le terme du potentiel à l'ordre deux qui correspond aux éléments de matrice de V^2: puisque V varie en R^{-3} (équation A.2), l'interaction varie donc en R^{-6}, ce qui correspond bien au potentiel de Van der Waals $V{=}{-}C_6/R^6$, où C_6 est le coefficient de Van der Waals.

Lorsque l'un des deux atomes en interaction est ionisé, le potentiel dominant aux grandes distances R est:

$$V = \frac{Q}{R^2}\sum_i q_i z_i, \tag{A.3}$$

où

$$Q = \sum_i q_i. \tag{A.4}$$

Le comportement de l'énergie d'interaction ion-atome neutre obtenu au second ordre de perturbations est alors en R^{-4}.

Finalement, si les deux atomes en interaction sont ionisés, aux grandes distances chacun d'eux se comporte comme une charge ponctuelle. Le potentiel d'interaction est de type Coulombien et est donné au second ordre de perturbations par:

$$V = \frac{QQ'}{R^2}. \tag{A.5}$$

Annexe B

Expressions des probabilités de dépolarisation et de transfert de polarisation

B.1 La moyenne angulaire de la probabilité de transition

La matrice de transition $T(\vec{b},\vec{v}) = I - S(\vec{b},\vec{v})$ (S est la matrice de diffusion) est calculée pour chaque collision dans la base $|J\ \mu_J\rangle$ associée au repère atomique dont l'axe de quantification est l'axe perpendiculaire au plan de collision $(\vec{b},\vec{v})$. Nous notons

- $\Omega(\alpha,\beta,\gamma)$ l'angle solide définissant l'orientation du repère atomique par rapport à un repère fixe du laboratoire
- $|J\ \xi_J\rangle$ le vecteur d'état exprimé en se référant au repère du laboratoire.

Les éléments de la matrice de rotation faisant correspondre à chaque vecteur $|J\ \xi_J\rangle$ son transformé $|J\ \mu_J\rangle$ dans la rotation $D(\alpha,\beta,\gamma)$ sont donnés par:

$$\mathcal{D}^{(J)}_{\mu\xi_J} = \langle\ J\ \mu|\mathcal{D}(\alpha,\beta,\gamma)|\ J\ \xi_J\rangle. \tag{B.1}$$

Nous avons alors:

$$|J'\xi'_J\rangle \quad = \quad \sum_{\mu'} |J'\ \mu'\rangle \mathcal{D}^{(J')}_{\mu'\xi'_J}(\alpha,\beta,\gamma) \tag{B.2}$$

et

$$\langle J\xi_J| \quad = \quad \sum_{\mu} [\mathcal{D}^{(J)}_{\mu\xi_J}(\alpha,\beta,\gamma)]^* \langle J\ \mu| \tag{B.3}$$

Les éléments de la matrice de transition dans la base $\{|J\ \xi_J\rangle\}$,

$$\langle\ J\ \xi_J|T|\ J'\ \xi'_J\rangle \quad = \quad \sum_{\mu,\mu'} \langle J\ \mu|T|J'\ \mu'\rangle [\mathcal{D}^{(J)}_{\mu\xi_J}]^* \mathcal{D}^{(J')}_{\mu'\xi'_J} \tag{B.4}$$

La probabilité de transition est donnée par,

$$|\langle\ J\ \xi_J|T|\ J'\ \xi'_J\rangle|^2 \quad = \quad \sum_{\mu,\mu',\nu,\nu'} \langle\ J\ \mu|T|\ J'\ \mu'\rangle \langle\ J\ \nu|T|\ J'\ \nu'\rangle^*\ \mathcal{D}^{(J)}_{\nu\xi_J} \mathcal{D}^{(J')}_{\mu'\xi'_J} [\mathcal{D}^{(J)}_{\mu\xi_J}]^* [\mathcal{D}^{(J')}_{\nu'\xi'_J}]^* \tag{B.5}$$

La proprieté de contraction des matrices de rotation donne:

$$\mathcal{D}^{(J)}_{\nu\xi_J} \mathcal{D}^{(J')}_{\mu'\xi'_J} \quad = \quad \sum_{J_p=|J-J'|}^{J+J'} \quad \sum_{p,p'=-J_p}^{J_p} \mathcal{D}^{(J_p)}_{pp'} \mathcal{C}^{JJ'J_p}_{\xi_J\xi'_J p'} \mathcal{C}^{JJ'J_p}_{\nu\mu' p} \tag{B.6}$$

et

$$[\mathcal{D}^{(J)}_{\mu\xi_J}]^*[\mathcal{D}^{(J')}_{\nu'\xi'_J}]^* = \sum_{J_n=|J-J'|}^{J+J'} \sum_{n,n'=-J_n}^{J_n} [\mathcal{D}^{(J_n)}_{nn'}]^* \mathcal{C}^{JJ'J_n}_{\xi_J\xi'_J n'} \mathcal{C}^{JJ'J_n}_{\mu\nu' n} \tag{B.7}$$

où $\mathcal{C}^{j_1 j_2 j}_{m_1 m_2 m}$ sont les coefficients de Clebsch Gordan tels que

$$\mathcal{C}^{j_1 j_2 j}_{m_1 m_2 m} = \sqrt{2j+1}(-1)^{j_1-j_2+m} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \tag{B.8}$$

En tenant compte des équations (A.6) et (A.7), l'équation (A.5) devient,

$$\begin{aligned} |\langle\, J\ \xi_J|T|\ J'\ \xi'_J\rangle|^2 &= \sum_{\mu,\mu',\nu,\nu'} \langle\, J\ \mu|T|\ J'\ \mu'\rangle\langle\, J\ \nu|T|\ J'\ \nu'\rangle^* \\ &\times \sum_{J_p=|J-J'|}^{J+J'} \sum_{p,p'=-J_p}^{J_p} \mathcal{D}^{(J_p)}_{pp'} \mathcal{C}^{JJ'J_p}_{\xi_J\xi'_J p'} \mathcal{C}^{JJ'J_p}_{\nu\mu' p} \\ &\times \sum_{J_n=|J-J'|}^{J+J'} \sum_{n,n'=-J_n}^{J_n} [\mathcal{D}^{(J_n)}_{nn'}]^* \mathcal{C}^{JJ'J_n}_{\xi_J\xi'_J n'} \mathcal{C}^{JJ'J_n}_{\mu\nu' n} \end{aligned} \tag{B.9}$$

La moyenne angulaire se fait par une integration sur $\Omega(\alpha,\beta,\gamma)$:

$$\frac{1}{8\pi^2}\oint d\Omega = \frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{\pi} \sin\beta d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma. \tag{B.10}$$

Compte tenu du théorème de Weyl sur l'orthogonalité des matrices de rotation (Weyl 1939, Brink & Satchler 1962):

$$\frac{1}{8\pi^2}\oint d\Omega [\mathcal{D}^{(J_n)}_{nn'}]^* \mathcal{D}^{(J_p)}_{pp'} = \frac{1}{2J_n+1}\delta_{np}\delta_{n'p'}\delta_{J_nJ_p}, \tag{B.11}$$

nous obtenons la moyenne angulaire de la probabilité de transition entre les sous-niveaux Zeeman:

$$\begin{aligned} \frac{1}{8\pi^2}\oint d\Omega |\langle\, J\ \xi_J|T|\ J'\ \xi'_J\rangle|^2 &= \langle P(J\xi_J \to J'\xi'_J, b, v)\rangle_{av} \\ &= \sum_{\mu,\mu',\nu,\nu'} \langle\, J\ \mu|T|\ J'\ \mu'\rangle\langle\, J\ \nu|T|\ J'\ \nu'\rangle^* \\ &\times \sum_{J_p=|J-J'|}^{J+J'} \frac{1}{2J_p+1} \sum_{p,p'=-J_p}^{J_p} (\mathcal{C}^{JJ'J_p}_{\xi_J\xi'_J p'})^2 \sum_{p=-J_p}^{J_p} \mathcal{C}^{JJ'J_p}_{\nu\mu' p} \mathcal{C}^{JJ'J_p}_{\mu\nu' p} \end{aligned} \tag{B.12}$$

B.2 Probabilités de dépolarisation et de transfert de polarisation

– La probabilité de dépolarisation est:

$$\begin{aligned} \langle P^k(nlJ,b,v)\rangle_{av} &= \langle P(nlJ,b,v)\rangle_{av} - (2k+1)\sum_{\xi_J,\xi'_J}(-1)^{2J-\xi_J-\xi'_J} \begin{pmatrix} J & k & J \\ -\xi_J & 0 & \xi_J \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} J & k & J \\ -\xi'_J & 0 & \xi'_J \end{pmatrix} \langle P(J\xi_J \to J\xi'_J, b, v)\rangle_{av}, \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned}\langle P(nlJ,b,v)\rangle_{av} &= \frac{1}{2J+1}\sum_{\xi_J,\xi'_J}|\langle\ J\ \xi_J|T|\ J'\ \xi'_J\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{2J+1}\sum_{\mu,\mu'}|\langle\ J\ \mu|T|\ J'\ \mu'\rangle|^2\end{aligned} \tag{B.13}$$

– La probabilité de transfert de polarisation est:

$$\begin{aligned}\langle P^k(nlJ\to nlJ',b,v)\rangle_{av} &= (2k+1)\sum_{\xi_J,\xi'_J}(-1)^{J+J'-\xi_J-\xi'_J}\begin{pmatrix} J & k & J \\ -\xi_J & 0 & \xi_J\end{pmatrix}\begin{pmatrix} J' & k & J' \\ -\xi'_J & 0 & \xi'_J\end{pmatrix} \\ &\quad\times\langle P(J\xi_J\to J'\xi'_J,b,v)\rangle_{av}\end{aligned} \tag{B.14}$$

Si nous posons

$$\begin{aligned}\mathcal{S} &= \sum_{\xi_J,\xi'_J}(-1)^{J+J'-\xi_J-\xi'_J}\begin{pmatrix} J & k & J \\ -\xi_J & 0 & \xi_J\end{pmatrix}\begin{pmatrix} J' & k & J' \\ -\xi'_J & 0 & \xi'_J\end{pmatrix} \\ &\quad\times\langle P(J\xi_J\to J'\xi'_J,b,v)\rangle_{av},\end{aligned} \tag{B.15}$$

alors les probabilités de dépolarisation $P^k(nlJ,b,v)$ et de transfert de polarisation $P^k(nlJ\to nlJ',b,v)$ peuvent s'écrire sous la forme:

$$\langle P^k(nlJ,b,v)\rangle_{av} = \frac{1}{2J+1}\sum_{\xi_J,\xi'_J}|\langle J\ \xi_J|T|J\ \xi'_J\rangle|^2 - (2k+1)\times\mathcal{S}\ \text{(dans le cas où } J=J') \tag{B.16}$$

et

$$\langle P^k(nlJ\to nlJ',b,v)\rangle_{av} = (2k+1)\times\mathcal{S}\quad\text{(dans le cas où } J\neq J') \tag{B.17}$$

Introduire l'expression de $\langle P(J\xi_J\to J'\xi'_J,b,v)\rangle_{av}(J=J'$ et $J\neq J')$ (équation A.12), dans les expressions des probabilités de dépolarisation et de transfert de polarisation, revient à l'introduire dans l'expression de $\mathcal{S}$. Par conséquent, nous allons nous occuper de l'expression de $\mathcal{S}$ qui devient alors:

$$\begin{aligned}\mathcal{S} &= \sum_{\xi_J,\xi'_J}(-1)^{J+J'-\xi_J-\xi'_J}\begin{pmatrix} J & k & J \\ -\xi_J & 0 & \xi_J\end{pmatrix}\begin{pmatrix} J' & k & J' \\ -\xi'_J & 0 & \xi'_J\end{pmatrix} \\ &\quad\times\sum_{\mu,\mu',\nu,\nu'}\langle\ J\ \mu|T|\ J'\ \mu'\rangle\langle\ J\ \nu|T|\ J'\ \nu'\rangle^* \\ &\quad\times\sum_{J_p=|J-J'|}^{J+J'}\frac{1}{2J_p+1}\sum_{p,p'=-J_p}^{J_p}(\mathcal{C}^{JJ'J_p}_{\xi_J\xi'_Jp'})^2\sum_{p=-J_p}^{J_p}\mathcal{C}^{JJ'J_p}_{\nu\mu'p}\mathcal{C}^{JJ'J_p}_{\mu\nu'p}\end{aligned} \tag{B.18}$$

En remplaçant les coefficients de Clebsch Gordan par leurs expressions données selon l'équation (A.8), nous pouvons écrire:

$$\mathcal{S} = \sum_{\mu,\mu',\nu,\nu'}\langle\ J\ \mu|T|\ J'\ \mu'\rangle\langle\ J\ \nu|T|\ J'\ \nu'\rangle^*(-1)^{J+J'}\sum_{J_p=|J-J'|}^{J+J'}(2J_p+1)$$

$$\begin{aligned}
&\times \sum_{\xi_J,\xi'_J} \sum_{p,p'=-J_p}^{J_p} (-1)^{\xi_J+\xi'_J} \begin{pmatrix} J & k & J \\ -\xi_J & 0 & \xi_J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J' & k & J' \\ -\xi'_J & 0 & \xi'_J \end{pmatrix} \\
&\times \begin{pmatrix} J & J' & J_p \\ \xi_J & \xi'_J & -p' \end{pmatrix}^2 \\
&\times \begin{pmatrix} J & J' & J_p \\ \nu & \mu' & -p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & J' & J_p \\ \mu & \nu' & -p \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{B.19}$$

Sachant que:

$$\begin{aligned}
\sum_{\xi_J,\xi'_J} \sum_{p'=-J_p}^{J_p} & (-1)^{\xi_J+\xi'_J} \begin{pmatrix} J & k & J \\ -\xi_J & 0 & \xi_J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J' & k & J' \\ -\xi'_J & 0 & \xi'_J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & J' & J_p \\ \xi_J & \xi'_J & -p' \end{pmatrix}^2 \\
&= (-1)^{J_p} \frac{1}{2k+1} \begin{Bmatrix} J' & J' & k \\ J & J & J_p \end{Bmatrix},
\end{aligned}$$

nous ré-écrivons $\mathcal{S}$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{S} &= \sum_{\mu,\mu',\nu,\nu'} \langle\, J\ \mu|T|\ J'\ \mu'\rangle \langle\, J\ \nu|T|\ J'\ \nu'\rangle^* (-1)^{J+J'} \sum_{J_p=|J-J'|}^{J+J'} (2J_p+1) \\
&\times \sum_p \begin{pmatrix} J & J' & J_p \\ \nu & \mu' & -p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & J' & J_p \\ \mu & \nu' & -p \end{pmatrix} (-1)^{J_p} \frac{1}{2k+1} \begin{Bmatrix} J' & J' & k \\ J & J & J_p \end{Bmatrix}
\end{aligned} \tag{B.20}$$

Aussi, en utilisant l'identité (Talmi 1993 p 157):

$$\begin{aligned}
\sum_{l_3,m'_3} (2l_3+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & j_2 & l_3 \\ m'_1 & m_2 & -m'_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m'_2 & m'_3 \end{pmatrix} (-1)^{j_3+l_3+m_1+m'_1} \\
= \sum_{m_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & j_3 \\ m'_1 & m'_2 & -m_3 \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{B.21}$$

après quelques transformations d'algebre angulaire sans complication, on a:

$$\begin{aligned}
\sum_{J_p=|J-J'|}^{J+J'} (2J_p+1)(-1)^{J_p} \sum_p \begin{pmatrix} J & J' & J_p \\ \nu & \mu' & -p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & J' & J_p \\ \mu & \nu' & -p \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} J' & J' & k \\ J & J & J_p \end{Bmatrix} \\
= \sum_\chi (-1)^{k+\mu-\mu'} \begin{pmatrix} J & J & k \\ \nu & -\mu & -\chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J' & J' & k \\ -\nu' & \mu' & \chi \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Finalement nous obtenons l'expression de $\mathcal{S}$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{S} &= \frac{1}{2k+1} \sum_{\mu,\mu',\nu,\nu'} \langle\, J\ \mu|T|\ J'\ \mu'\rangle \langle\, J\ \nu|T|\ J'\ \nu'\rangle^* \\
&\times \sum_\chi (-1)^{J+J'+k+\mu-\mu'} \begin{pmatrix} J & J & k \\ \nu & -\mu & -\chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J' & J' & k \\ -\nu' & \mu' & \chi \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{B.22}$$

et nous retrouvons ainsi, en faisant attention aux notations, les formules données par Gordeev et al. (1970), Sahal-Bréchot (1974) et Omont (1977):

– la probabilité de dépolarisation:

$$\langle P^k(nlJ,b,v)\rangle_{av} = \frac{1}{2J+1}\sum_{\mu,\mu'}|\langle\, J\ \mu|T|\ J\ \mu'\rangle|^2 - \sum_{\mu,\mu',\nu,\nu'}\langle\, J\ \mu|T|\ J\ \mu'\rangle\langle\, J\ \nu|T|\ J\ \nu'\rangle^* \tag{B.23}$$
$$\times \sum_{\chi}(-1)^{2J+k+\mu-\mu'}\begin{pmatrix} J & J & k \\ -\nu' & \mu' & \chi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J & J & k \\ \nu & -\mu & -\chi \end{pmatrix}$$

– la probabilité de transfert de polarisation:

$$\begin{aligned}\langle P^k(nlJ\to nlJ',b,v)\rangle_{av} &= \sum_{\mu,\mu',\nu,\nu'}\langle\, J\ \mu|T|\ J'\ \mu'\rangle\langle\, J\ \nu|T|\ J'\ \nu'\rangle^* \\ &\times \sum_{\chi}(-1)^{J+J'+k+\mu-\mu'}\begin{pmatrix} J & J & k \\ \nu & -\mu & -\chi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J' & J' & k \\ -\nu' & \mu' & \chi \end{pmatrix} \\ &= \sum_{\mu,\mu',\nu,\nu'}\langle\, J\ \mu|T|\ J'\ \mu'\rangle\langle\, J\ \nu|T|\ J'\ \nu'\rangle^* \\ &\times \sum_{\chi}(-1)^{J-J'+\mu-\mu'}\begin{pmatrix} J & J & k \\ \nu & -\mu & \chi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J' & J' & k \\ \nu' & -\mu' & \chi \end{pmatrix}\end{aligned} \tag{B.24}$$

Annexe C

Articles à referee

A&A 404, 763–773 (2003)
DOI: 10.1051/0004-6361:20030568
© ESO 2003

Astronomy & Astrophysics

Semi-classical theory of collisional depolarization of spectral lines by atomic hydrogen I. Application to p states of neutral atoms

M. Derouich[1], S. Sahal-Bréchot[1], P. S. Barklem[2], and B. J. O'Mara[†3]

[1] Observatoire de Paris-Meudon, LERMA UMR CNRS 8112, 5 place Jules Janssen, 92195 Meudon Cedex, France
[2] Department of Astronomy and Space Physics, Uppsala University, Box 515, S 751 20 Uppsala, Sweden
[3] Department of Physics, The University of Queensland, St Lucia 4072, Australia

Received 29 November 2002 / Accepted 4 April 2003

Abstract. The present paper extends the method of Anstee, Barklem and O'Mara (Anstee 1992; Anstee & O'Mara 1991, 1995; Anstee et al. 1997; Barklem 1998; Barklem & O'Mara 1997; Barklem et al. 1998), developed during the 1990s for collisional line broadening by atomic hydrogen, to the depolarization of spectral lines of neutral atoms by collisions with atomic hydrogen. In the present paper, we will limit the calculations to p ($l = 1$) atomic levels. The depolarization cross sections and depolarization rates are computed. In Table 2 cross sections as functions of the relative velocity and effective quantum number are given, allowing for the computation for any p atomic level. Our results are compared to quantum chemistry calculations where possible. The sensitivity of depolarization cross sections to regions of the potential is examined. We conclude that the accuracy obtained with our method (<20% for the depolarization rates) is promising for its extension to higher l-values for the interpretation of the "second solar spectrum". This will be the object of further papers.

Key words. Sun: atmosphere – atomic processes – line: formation – polarization – atomic data

1. Introduction

Observations of linear polarization at the limb of the Sun produce rich structures. This polarization spectrum (the so-called "second solar spectrum") is an entirely new spectrum to be explored and interpreted (Stenfo & Keller 1997). This polarization is due to scattering of the incident anisotropic solar radiation field. The radiative anisotropy is due to the structure of the semi-infinite or layer atmosphere in the vicinity of the surface, and is revealed by the center-to-limb darkening of the solar brightness.

In order to interpret quantitatively the Stokes parameters of the observed lines, a non-optically-thin and non-LTE model in the presence of a magnetic field has to be used. In fact, collision induced transitions between Zeeman sublevels can play a major role in depolarizing the levels (and thus the lines). Depolarizing collisions of the radiating and absorbing atoms with neutral hydrogen atoms of the medium have to be included in the statistical equilibrium equations. Very few depolarization rates have currently been computed, they have been obtained through sophisticated quantum chemistry methods which are accurate but cumbersome. It would be useful to develop methods capable of giving reasonable results for many levels rapidly. This is the object of the present work.

During the 1990s Anstee, Barklem and O'Mara (Anstee 1992; Anstee & O'Mara 1991, 1995; Anstee et al. 1997; Barklem 1998; Barklem & O'Mara 1997; Barklem et al. 1998) developed a new semi-classical theory, in order to obtain spectral line widths due to collisions with atomic hydrogen that were better than those obtained by the Van der Waals approximation. In this theory, which will be referred as ABO in the following, the scattering S matrix is obtained by solving semi-classical coupled differential equations. The hydrogen-atom interaction potential is derived from time-independent second-order perturbation theory without exchange, allowing the Lindholm-Foley average over m states (Brueckner 1971; O'Mara 1976) to be removed. Whereas the Van der Waals potential underestimates the broadening by typically a factor two or more, the ABO method gives rather good agreement (<20% for the spectral line widths) with the results obtained from quantum chemistry calculations. In addition, these authors used their ABO method by applying it to a selection of strong solar lines. The derived abundances are consistent with meteoritic ones.

In the present paper, we extend the ABO theory to the calculation of collisional depolarization rates which enter the statistical equilibrium equations for the polarized atomic density

Send offprint requests to: M. Derouich,
e-mail: Moncef.Derouich@obspm.fr

matrix. This paper is focused on the method and is applied to p states of neutral atoms. We will present and compare our results with those recently obtained by quantum chemistry methods. We also compare the results to the depolarization rates calculated with the Van der Waals interaction. A discussion of our results is given, studying the region of the potential curves which play the major role in the variation of the depolarization cross sections. In conclusion, we show that our method, owing to the simplicity of the processes taken into account, is a useful alternative to the accurate but time consuming quantum chemistry method for obtaining most of the depolarization rates to better than 20% accuracy. It should now be possible to rapidly obtain the large amount of data needed for the interpretation of the second solar spectrum, in particular for the heavy atoms that are inaccessible to present quantum chemistry calculations. An extension to d and f states is in progress. An extension to ions is in progress and this will be the subject of further papers.

2. Formulation of the problem

2.1. The statistical equilibrium equations (SEE) for polarization studies

The calculation of the Stokes parameters of a spectral line observed at the solar limb is a non-LTE (Local Thermodynamical Equilibrium) problem. It needs the solution of the coupling between the polarized radiative transfer and the statistical equilibrium equations (SEE) for the populations and coherences of the polarized atomic density matrix. In fact the atomic levels are only "aligned", which means that the observed lines are globally linearly polarized. This linear polarization is due to anisotropic scattering of the incident solar radiation field which contributes to excitation of the atomic levels, the anisotropy being due to limb darkening, even at zero altitude above the limb.

Sahal-Bréchot (1977) developed the SEE for an "aligned" multilevel atom, i.e. for the Zeeman sublevels $|\alpha J M_J\rangle$. She took into account excitation by the anisotropic solar radiation field, deexcitation by spontaneous and induced emission, and excitation, deexcitation, polarization transfer and depolarization by isotropic collisions of the particles of the medium. She included the effect of a "strong" magnetic field (strong case of the Hanle effect) and thus coherences between Zeeman sublevels could be ignored. Only the populations of the Zeeman sublevels were taken into account.

She wrote these equations both in the dyadic basis $|\alpha J M_J\rangle\langle\alpha' J' M'_J|$ built on the standard basis of the atomic states $|\alpha J M_J\rangle$ and in the irreducible tensorial operator basis ${}^{\alpha J\alpha' J'}T^k_q$. The expansion of the ${}^{\alpha J\alpha' J'}T^k_q$ over the dyadic basis is given by Fano & Racah (1959) (cf. also Messiah 1961; Fano 1963):

$$ {}^{\alpha J\alpha' J'}T^k_q = \sum_{M_J M'_J} (-1)^{J'-M'_J} \times |\alpha J M_J\rangle\langle\alpha' J' M'_J|\langle J J' M_J - M'_J|k-q\rangle, \quad (1) $$

where $\langle J J' M_J - M'_J|k-q\rangle$ is a Clebsch-Gordan coefficient. She demonstrated the interest and power of this second basis, which is especially well adapted to problems with spherical and/or cylindrical symmetry processes. The equations are simplified, and the physics is extracted and highlighted. In particular, the odd k-terms can be eliminated from the SEE when the incident radiation field is anisotropic but unpolarized. In fact the natural radiation field transports $k = 0$ (population) and $k = 2$ (alignment) terms only. Orientation terms ($k = 1$) vanish in the present astrophysical problem.

Sahal-Bréchot (1977) gave the general expressions for the various transition probabilities due to isotropic and anisotropic radiation and for isotropic collisions, i.e. expressions for population, orientation and alignment transfer between the levels, creation and destruction of population, orientation and alignment (depolarization rates in particular). At the same time, Omont (1977) developed a general theory of relaxation for a two-level atom. In addition he introduced coherences.

In fact, for isotropic processes, the coupling terms in the SEE implying transfer of coherence $q \to q'$ are zero, and due to the isotropy of the collisions with hydrogen, the depolarization rates are q-independent. This is one of the advantages of the irreducible tensorial operator basis. Therefore, as we will consider isotropic collisions only in the following, it will be sufficient to calculate collisional cross sections between the sublevels, as for the no-coherence case (Sahal-Bréchot 1977), even if coherences play a role in the SEE. We recall that coherences can appear when the magnetic field is weak and not directed along the solar radius (Hanle effect). We also notice that in the present paper we are interested in hydrogen-atom collisions and not in electron or proton-ion collisions as in Sahal-Bréchot (1977). After integration of the cross sections over a Maxwell distribution of velocities and multiplying by the local hydrogen density, the depolarization rates obtained (and eventually polarization transfer rates between levels) can be used in the statistical equilibrium equations.

We focus on the collisional depolarization rates in the present paper. We will use both the dyadic and the irreducible tensorial operator bases. The latter one is in fact more convenient.

An important preliminary point to notice is the fact that the radiating atom can have a nuclear spin and thus hyperfine structure. The importance of the effect of the hyperfine structure on the Stokes parameters of the line studied was discussed for the example of the hydrogen coronal line Lyα by Bommier & Sahal-Bréchot (1982). They showed that the SEE must be solved for the hyperfine levels when the inverse of the lifetime of the upper level is smaller than the hyperfine splitting, i.e. the hyperfine levels are separated. This arises from the Heisenberg uncertainty principle. On the contrary, when the hyperfine splitting is small compared to the inverse of the lifetime, the hyperfine levels are mixed and degenerate, the hyperfine structure can be ignored and the SEE can be solved for the $|\alpha J\rangle$ fine structure levels. This was the case for the hydrogen coronal line where the F levels are degenerate and the J levels are well separated.

In the second solar spectrum, where metallic lines are observed, the inverse of the lifetime (9.7 MHz for the Na D lines) (Gaupp et al. 1982) is often small compared to the hyperfine splitting (if it exists) (cf. Table 1). Then the SEE must

Table 1. Values of the energy separation between the hyperfine levels F and $F-1$ for: Na in the ground state, 3s $^2S_{1/2}$ (Ackermann 1966), and in the excited state 3p $^2P_{3/2}$ (Gangrsky et al. 1998). All energies are in MHz.

F	$\Delta E_{\rm HFS}(^2P_{3/2})$	$\Delta E_{\rm HFS}(^2S_{1/2})$
3	58.44	-
2	34.32	1772
1	15.86	-

be solved for the $|\alpha JF\rangle$ hyperfine levels (Bommier & Molodij 2002; Kerkeni & Bommier 2002) and collisional rates between the hyperfine sublevels must be calculated.

2.2. Dyadic basis for the depolarization rates

The depolarization arises from isotropic collisions between the Zeeman sublevels of a level $|\alpha J\rangle$: the collisions reestablish thermodynamical equlibrium between the sublevels and thus atomic polarization vanishes. We have to calculate (Sahal-Bréchot 1977) for each sublevel $|\alpha JM_J\rangle$ (or $|\alpha JFM_F\rangle$ if there is an hyperfine structure):

$$D(\alpha JM_J,T)=\sum_{M'_J\neq M_J}\zeta(\alpha JM_J\to\alpha JM'_J,T) \tag{2}$$

where $\zeta(\alpha JM_J\to\alpha JM'_J,T)$ is the collisional transition rate between the sublevels $|\alpha JM_J\rangle\to|\alpha JM'_J\rangle$. It can be written as a function of the local temperature T and the hydrogen perturber local density $n_{\rm H}$:

$$\zeta(\alpha JM_J\to\alpha JM'_J,T)\;=\;n_{\rm H}\int_0^\infty\sigma(\alpha JM_J\to\alpha JM'_J,v)\times vf(v){\rm d}v, \tag{3}$$

$f(v)$ being the distribution function for the atom-perturber relative velocity v, and $\sigma(\alpha JM_J\to\alpha JM'_J,v)$ is the cross section. For the Maxwellian distribution,

$$f(v)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\mu}{kT}\right)^{\frac{3}{2}}v^2\exp\left(-\frac{\mu v^2}{2kT}\right), \tag{4}$$

where μ is the reduced mass of the system.

The relaxation term for the density matrix (diagonal term of the system of SEE) due to collisions is given by:

$$\left(\frac{{\rm d}^{\alpha J}\rho_{M_JM_J}}{{\rm d}t}\right)_{\rm coll}\;=\;-D(\alpha JM_J,T)\quad{}^{\alpha J}\rho_{M_JM_J}-\sum_{\alpha'J'\neq\alpha J}\sum_{M'_J}\zeta(\alpha JM_J\to\alpha J'M'_J,T)\times{}^{\alpha J,\alpha'J'}\rho_{M_JM'_J}. \tag{5}$$

The terms added to the depolarization term $D(\alpha JM_J,T)$ are the so-called quenching terms.

The dyadic basis is not suitable because the depolarization terms depend on the chosen dyadic basis. The ${}^{\alpha J,\alpha'J'}T^k_q$ basis is well adapted because the depolarization terms do not depend on the basis and have a physical interpretation.

2.3. Basis of irreducible tensorial operators

In this basis, the SEE relaxation term in the non-coherence case ($q=0$) (Sahal-Bréchot 1977; Omont 1977) becomes

$$\left(\frac{{\rm d}^{\alpha J}\rho^k_0}{{\rm d}t}\right)_{\rm coll}=-D^k(\alpha J,T)^{\alpha J\alpha J}\rho^k_0+\text{quenching term}, \tag{6}$$

where ${}^{\alpha J}\rho^k_0$ is the multipole k-moment of the density matrix for the level $|\alpha J\rangle$. For isotropic collisions $D^k(\alpha J,T)$ is characterized by $(2J+1)$ constants $(0\le k\le 2J)$ and $D^0(\alpha J,T)$ is called the destruction rate of population, which is zero for the no-quenching approximation. $D^1(\alpha J,T)$ is the destruction rate of orientation (circular atomic polarization). $D^2(\alpha J,T)$ is the destruction rate of alignment which is of interest in astrophysics (linear polarization), and the depolarization rate $D^k(\alpha J,T)$ is given by:

$$D^k(\alpha J,T)=n_{\rm H}\int_0^\infty\sigma^k(\alpha J,v)vf(v){\rm d}v. \tag{7}$$

Using our present notation, formula (20) in Sahal-Bréchot (1977) with $k=k'$ can be written as:

$$\begin{aligned}\sigma^k(\alpha J,v)\;=\;&(2k+1)\sum_{M'_J}\sum_{M_J\neq M'_J}(-1)^{2J-2M_J}\\&\times\begin{pmatrix}J&k&J\\-M_J&0&M_J\end{pmatrix}^2\sigma(\alpha JM_J\to\alpha JM'_J,v)\\&-(2k+1)\sum_{M_J}\sum_{M'_J\neq M_J}(-1)^{2J-M_J-M'_J}\\&\times\begin{pmatrix}J&k&J\\-M_J&0&M_J\end{pmatrix}\begin{pmatrix}J&k&J\\-M'_J&0&M'_J\end{pmatrix}\\&\times\sigma(\alpha JM_J\to\alpha JM'_J,v).\end{aligned} \tag{8}$$

The expressions between parentheses denote $3j$-coefficients (Messiah 1961). After some calculations which are not detailed here, this equation can also be written as:

$$\begin{aligned}\sigma^k(\alpha J,v)\;=\;&\sigma(\alpha J,v)-(2k+1)\sum_{M_J,M'_J}(-1)^{2J-M_J-M'_J}\\&\times\begin{pmatrix}J&k&J\\-M_J&0&M_J\end{pmatrix}\begin{pmatrix}J&k&J\\-M'_J&0&M'_J\end{pmatrix}\\&\times\sigma(\alpha JM_J\to\alpha JM'_J,v).\end{aligned} \tag{9}$$

Where $\sigma(\alpha J,v)$ is the elastic cross section for the level $|\alpha J\rangle$ and the relative velocity v:

$$\sigma(\alpha J,v)=\sum_{M'_J}\sigma(\alpha JM_J\to\alpha JM'_J,v). \tag{10}$$

This cross section can also be written as an average over the initial states M_J as usual:

$$\sigma(\alpha J,v)=\frac{1}{2J+1}\sum_{M_J,M'_J}\sigma(\alpha JM_J\to\alpha JM'_J,v) \tag{11}$$

where the angular average over all the directions of the collisions is not necessary here because the averaging over M'_J is equivalent to the angular average over the directions of the

collision. This property will be used in Sect. 6, first line in Eq. (41).

Since the depolarization cross section $\sigma^k(\alpha J, v)$ can be written as a linear combination of the $\sigma(\alpha J M_J \to \alpha J M'_J, v)$, the depolarization rate $D^k(\alpha J, v)$ is a linear combination of the collisional rates between the Zeeman sublevels $\zeta(\alpha J M \to \alpha J M')$ (Sahal-Bréchot 1977). In particular we have (Sahal-Bréchot 1977), for $J = 1$:

$$D^1(\alpha 1) = \zeta(10 \to 1 \pm 1) + 2\zeta(1 \mp 1 \to 1 \pm 1)$$
$$D^2(\alpha 1) = 3\zeta(10 \to 1 \pm 1),$$

and for $J = 3/2$ (Gordeyev et al. 1969; Roueff & Suzor 1974):

$$D^1\left(\alpha\,\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{5}\,\zeta\left(\frac{3}{2}\,\frac{-1}{2} \to \frac{3}{2}\,\frac{1}{2}\right) + \frac{2}{5}\,\zeta\left(\frac{3}{2}\,\frac{3}{2} \to \frac{3}{2}\,\frac{1}{2}\right) + \frac{8}{5}\,\zeta\left(\frac{3}{2}\,\frac{-3}{2} \to \frac{3}{2}\,\frac{1}{2}\right) + \frac{9}{5}\,\zeta\left(\frac{3}{2}\,\frac{-3}{2} \to \frac{3}{2}\,\frac{3}{2}\right)$$

$$D^2\left(\alpha\,\frac{3}{2}\right) = 2\,\zeta\left(\frac{3}{2}\,\frac{3}{2} \to \frac{3}{2}\,\frac{1}{2}\right) + 2\,\zeta\left(\frac{3}{2}\,\frac{-1}{2} \to \frac{3}{2}\,\frac{1}{2}\right) + 2\,\zeta\left(\frac{3}{2}\,\frac{-3}{2} \to \frac{3}{2}\,\frac{1}{2}\right)$$

$$D^3\left(\alpha\,\frac{3}{2}\right) = \frac{9}{5}\,\zeta\left(\frac{3}{2}\,\frac{-1}{2} \to \frac{3}{2}\,\frac{1}{2}\right) + \frac{8}{5}\,\zeta\left(\frac{3}{2}\,\frac{3}{2} \to \frac{3}{2}\,\frac{1}{2}\right) + \frac{2}{5}\,\zeta\left(\frac{3}{2}\,\frac{-3}{2} \to \frac{3}{2}\,\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{5}\,\zeta\left(\frac{3}{2}\,\frac{-3}{2} \to \frac{3}{2}\,\frac{3}{2}\right).$$

3. Calculation of the cross sections

We will use a semi-classical treatment for the collision: we will assume that the hydrogen perturbing atom moves along a straight path, unperturbed by the collision process and characterized by an impact-parameter b.

In the dyadic basis $|\alpha J M_J\rangle\langle\alpha' J' M'_J|$ (or $|\alpha J F M_F\rangle\langle\alpha' J' F' M'_F|$ if there is an hyperfine structure), the cross section follows from an integration over the impact-parameter b and averaging the transition probability $P(\alpha J M_J \to \alpha J M'_J, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{v})$ over all the collision directions:

$$\sigma(\alpha J M_J \to \alpha J M'_J, v) = \int_0^\infty 2\pi b \mathrm{d}b \left(\frac{1}{8\pi^2} \times \oint P(\alpha J M_J \to \alpha J M'_J, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{v}) \mathrm{d}\Omega \right) \tag{12}$$

and then the collisional transition rate is given by Eq. (3). The transition probability can be written in terms of the S-matrix elements,

$$P(\alpha J M_J \to \alpha J M'_J, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{v}) = |\langle\alpha J M_J | I - S(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{v}) | \alpha J M'_J\rangle|^2 \tag{13}$$

where I is the unit matrix and $T = I - S$ is the so-called transition matrix.

3.1. Calculation of the S-matrix

The Hamiltonian of the system atom-perturber can be written as:

$$H = H_\mathrm{A} + H_\mathrm{P} + V, \tag{14}$$

where H_A is the atomic Hamiltonian, H_P that of the perturber and V is the interaction energy. H_A can be written as:

$$H_\mathrm{A} = H_0 + H_\mathrm{FS} + H_\mathrm{HFS}, \tag{15}$$

where H_0 contains the electrostatic part, H_FS the fine structure and H_HFS the hyperfine structure if it exists.

It can be shown that the hyperfine splitting ΔE_HFS is always small when compared to V and thus J and I (the nuclear spin) can be decoupled during the collision process. This arises from the Heisenberg uncertainty principle: if τ is a typical collision time, one can ignore the hyperfine structure if

$$\tau\,\Delta E_\mathrm{HFS} \ll 1, \tag{16}$$

where $\tau \sim \frac{b}{v}$, b being a typical impact-parameter (of the order of 10 a_0, a_0 being the Bohr radius) and $v \sim 4.8 \times 10^{-3}$ a.u. for a temperature of about 5000 K so that $\tau \sim 2.08 \times 10^3$ a.u.. In the case of the Na atom the nuclear spin is $I = 3/2$, which yields two hyperfine levels in the ground state 3s $^2\mathrm{S}_{1/2}$, $F = 1$ and $F = 2$. For the excited 3p $^2\mathrm{P}_{3/2}$ state there are four hyperfine levels: $F = 0$, $F = 1$, $F = 2$ and $F = 3$. The energy differences between these levels are given in Table 1. In the case of the ground state 3s $^2\mathrm{S}_{1/2}$, $\Delta E_\mathrm{HFS} \simeq 2.694 \times 10^{-7}$ a.u. (1772 MHz) (Ackermann 1966) and then $\tau\,\Delta E_\mathrm{HFS} \simeq 5.6 \times 10^{-4} \ll 1$. For the excited level the most important hyperfine splitting is, of course, between the levels $F = 0$ and $F = 3$ where $\Delta E_\mathrm{HFS} \simeq 1.653 \times 10^{-8}$ a.u. (108.72 MHz) (Gangrsky et al. 1998) and then $\tau\,\Delta E_\mathrm{HFS} \simeq 3.4 \times 10^{-5} \ll 1$.

The hyperfine splitting can always be ignored in the treatment of the collision under these conditions. We have $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{J}$ and $M_F = M_I + M_J$, and

$$|\alpha J F M_F\rangle = \sum_{M_I, M_J} \langle I J M_I M_J | F M_F\rangle |J M_J\rangle |I M_I\rangle, \tag{17}$$

where $\langle I J M_I M_I | F M_F\rangle$ is a Clebsch-Gordan coefficient. Then the matrix element

$$\langle\alpha J F M_F | S | \alpha' J' F' M'_F\rangle = \sum_{M_I, M_J, M'_I, M'_J} \langle I J M_I M_J | F M_F\rangle \times \langle I J' M'_I M'_J | F' M'_F\rangle \langle\alpha J M_J | \langle I M_I | S | I M'_I\rangle | \alpha' J' M'_J\rangle. \tag{18}$$

If the hyperfine structure can be neglected during the collision, the S-matrix is diagonal in I and its elements do not depend on M_I (I is conserved). Thus $M'_I = M_I$ and

$$\langle\alpha J F M_F | S | \alpha' J' F' M'_F\rangle = \sum_{M_I, M_J, M'_J} \langle I J M_I M_J | F M_F\rangle \times \langle I J' M_I M'_J | F' M'_F\rangle \langle\alpha J M_J | S | \alpha' J' M'_J\rangle. \tag{19}$$

This relation holds for each impact-parameter and each relative velocity.

We recall the relation between Clebsch-Gordan coefficients and $3j$-coefficients:

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j m\rangle = \sqrt{2j+1}(-1)^{j_1 - j_2 + m} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}.$$

We use the convention of Messiah (1961) for the phase factors.

3.2. Calculation of the S-matrix elements between fine sublevels

The fine structure splitting can generally be neglected during the collision problem at the temperature of interest in the second solar spectrum (~5000 K). The validity of the condition is the same as above, except that the fine structure splitting is larger than the hyperfine splitting. For example in the case of the Na atom, at 5000 K, $\Delta E_{\rm FS} \simeq 0.78 \times 10^{-4}$ a.u. and $\tau \simeq 2.08 \times 10^3$ a.u. and so $\tau\ \Delta E_{\rm FS} \simeq 0.16 < 1$. This has been discussed in earlier papers focussed on collisional line broadening, see for example Roueff (1974) and related papers. She showed that the fine structure splitting is of importance at low temperatures (200–500 K) for the sodium D lines and negligible at higher temperatures for line broadening studies (500 K and higher). The D_1 and D_2 lines have in fact the same collisional width for hydrogen perturbers at solar temperatures.

If the fine structure is neglected, where $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{S} + \boldsymbol{l}$, and $M_J = M_S + m_l$, we have:

$$\langle \alpha l J M_J | S | \alpha' l' J' M'_J \rangle = \sum_{M_S, m_l, m'_l} \langle S\, l M_S\, m_l | J M_J \rangle \times \langle S\, l' M_S\, m'_l | J' M'_J \rangle \langle \alpha l m_l | S | \alpha' l' m'_l \rangle, \tag{20}$$

cf. Eq. (19).

However, we notice that the parallelism between line broadening and depolarization cross sections must be used carefully in the peculiar following case. Depolarization of hyperfine components of spherically symmetric $J = J' = 1/2$ levels (ground state of sodium for instance), needs the matrix elements $M_J = \pm\frac{1}{2} \rightarrow M'_J = \pm\frac{1}{2}$. If the fine structure is neglected, they are zero and the depolarization and polarization transfer rates of the hyperfine components of the ground states are zero. Kerkeni et al. (2000) calculated the hyperfine collisional depolarization rates for the ground state of sodium with a quantum chemistry method which takes into account the fine structure splitting during the interaction processes. They showed that these rates are of the same order of magnitude as those of upper levels for which the fine structure splitting plays a minor role in the collisional processes. In fact this remark does not concern $l \geq 1$ states and is very specific. However, we consider that it is important to mention it.

4. The model of Anstee, Barklem and O'Mara (ABO)

The present semi-classical model used for the depolarization is the same one as that already developed for line broadening theory applications in the 1990s by Anstee, Barklem and O'Mara (Anstee 1992; Anstee & O'Mara 1991, 1995; Anstee et al. 1997; Barklem 1998; Barklem & O'Mara 1997; Barklem et al. 1998).

The theory is described in these papers, and thus only a brief review is presented in the following:

1. The model is of semi-classical nature, the internal states of the two atoms are treated within the framework of quantum mechanics and the collision is modelled with the straight path classical approximation: it is assumed that the interparticle interaction is too weak to deflect the perturbed particle from the straight classical path.

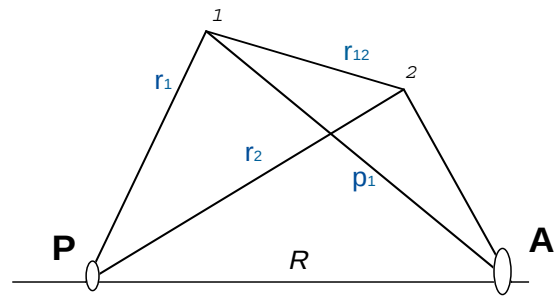

Fig. 1. The perturbed atom core is located at A and the hydrogen perturbing core (a proton) at P. Their valence electrons are denoted by 1 and 2 respectively.

2. The interaction energy between the two atoms is smaller than the energy eigenvalues of the isolated atoms, so that the Rayleigh-Schrödinger perturbation theory can be used for obtaining perturbed eigenvalues. Ionic and exchange interactions are neglected. The hyperfine and fine structure interactions are also neglected.

3. Time-independent perturbation theory is applied to second order. It is assumed that the energy denominator in the second order term can be replaced by a suitable average energy $E_{\rm p}$. This is the Unsöld approximation (Unsöld 1927; Unsöld 1955). The value $E_{\rm p} = -4/9$, in atomic units, is adopted. This approximation works when the energy level separations of the perturbed atom are small compared with those of hydrogen. For neutral atoms this condition is generally satisfied. This is particularly valid when considering interactions with hydrogen in the ground state, like in this work, which is well separated from any other levels (Anstee & O'Mara 1991).

4. Unperturbed atomic eigenfunctions are used. The Coulomb approximation with quantum defect is used.

5. Treatment of the collision

Each collision is characterized by an impact-parameter vector $\boldsymbol{b}$ and a relative velocity vector $\boldsymbol{v}$. Since the hyperfine and fine structure interactions are neglected, Eq. (14) becomes:

$$H = H_0 + H_{\rm P} + V \tag{21}$$

where V is the interaction energy which is assumed to be totally electrostatic. Only V depends on time. In the coordinate system of Fig. 1, V is given, in atomic units, by (Anstee & O'Mara 1991):

$$V = \frac{1}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_2} - \frac{1}{p_1} \tag{22}$$

and atomic units are used hereafter.

Since the hydrogen perturber remains in its ground state $1s$ during the collision, the wave function $|\psi\rangle$ of the system (atom+perturber), is the product of the wave functions $|\psi\rangle_{\rm (A)}$ of the perturbed atom and that of hydrogen in its ground state $|100\rangle_{\rm (H)}$:

$$|\psi\rangle = |\psi\rangle_{\rm (A)} |100\rangle_{\rm (H)}. \tag{23}$$

The eigenenergy of the hydrogen perturber in its ground state is denoted by $E^0_{\rm H}$. Following Anstee & O'Mara (1991), we use second-order time-independent perturbation theory for the eigenenergy of the system.

We also use the unperturbed atomic wave functions defined by:

$$H_0|nlm_l\rangle = E^0_{nlm_l}|nlm_l\rangle; |\psi\rangle_{(\rm A)} = |nlm_l\rangle. \tag{24}$$

They form a complete set of eigenfunctions $|nlm_l\rangle$ and eigenvalues $E^0_{nlm_l}$. The perturbed eigenvalues of the system of Hamiltonian H can be written as:

$$E_i = E^0_i + \langle i|V|i\rangle + \sum_{j\neq i} \frac{\langle i|V|j\rangle\langle j|V|i\rangle}{E^0_i - E^0_j}, \tag{25}$$

the summation being over all product states $|j\rangle = |\psi\rangle_{(\rm A)}|\psi\rangle_{(\rm H)}$ except $|i\rangle = |nlm_l\rangle_{(\rm A)}|100\rangle_{(\rm H)}$, and where $E^0_i = E^0_{nlm_l} + E^0_{\rm H}$.

Quenching is neglected and thus we consider only the subspace nl ($2l$+1 states) and we denote the product state of the two separated atom at $R = \infty$ by $|M_l\rangle$ (Anstee & O'Mara 1991),

$$|M_l\rangle = |i\rangle = |nlm_l\rangle_{(\rm A)}|100\rangle_{(\rm H)}. \tag{26}$$

We introduce an effective potential $V_{\rm eff}$, the diagonal elements of which are defined as

$$\langle M_l|V_{\rm eff}|M_l\rangle = E_{M_l} - E^0_{M_l}. \tag{27}$$

The evaluation of the second order contribution to the above expression (25) is very difficult because it requires a summation over the complete set of eigenstates of the two isolated atoms. However, the expression can be greatly simplified by using the Unsöld approximation, i.e. by replacing $E^0_i - E^0_j$ by the constant value $E_{\rm p}$. With this approximation, the expression for $V_{\rm eff}$ becomes

$$\langle M_l|V_{\rm eff}|M_l\rangle = \langle M_l|V|M_l\rangle - \frac{1}{E_{\rm p}}(\langle M_l|V|M_l\rangle)^2 + \frac{1}{E_{\rm p}}\langle M_l|V^2|M_l\rangle, \tag{28}$$

where $\langle M_l|V_{\rm eff}|M_l\rangle$ is the so-called Rayleigh-Schrödinger-Unsöld (RSU) potential which is used throughout the ABO model. Then, for computing the RSU potential, explicit expressions for the wave functions are needed.

The perturbed atom is modelled as a single valence electron outside a spherical ionic core. The chosen radial functions are of Coulomb type (Seaton 1958). The quantum defect and thus the effective quantum number $n^* = [2(E_\infty - E_{nl})]^{-1/2}$ is a fundamental ingredient of the calculation of the interaction potential used in the ABO model. We refer to the ABO papers for more details concerning the interaction potential.

The S-matrix requires the time-dependent Schrödinger equation to be solved, i.e.

$$(H_0 + H_{\rm P} + V_{\rm eff})|\psi(t)\rangle = {\rm i}\frac{{\rm d}|\psi(t)\rangle}{{\rm d}t} \tag{29}$$

where the interaction potential V is now replaced by $V_{\rm eff}$. The S-scattering matrix is defined by:

$$S = U(+\infty, -\infty) \tag{30}$$

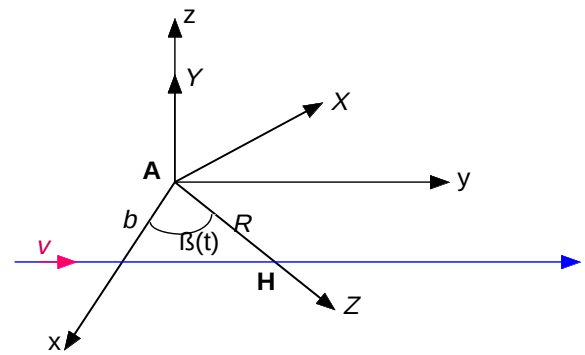

Fig. 2. Trajectory of the perturber (H) in the two reference frames. R is the interatomic separation, $R = \sqrt{b^2 + v^2t^2}$. *Axyz* and *AXYZ* are the atomic and rotating frames.

where $U(+\infty, -\infty)$ is the evolution operator in the interaction representation, where

$$\widetilde{\psi}(t+s) = U^\dagger(t+s,t)\psi(t) = {\rm e}^{{\rm i}(H_0+H_{\rm P})s}\psi(t), \tag{31}$$

is the corresponding wave function. The wave function is expressed in terms of the basis formed by the eigenvectors $|M_l\rangle$ of $(H_0 + H_{\rm P})$ given by (26) so that:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{M_l} a_{M_l}(t){\rm e}^{-{\rm i}E^0_{M_l}t}|M_l\rangle; \tag{32}$$

$$|\widetilde{\psi}(t)\rangle = \sum_{M_l} a_{M_l}(t)|M_l\rangle$$

and we obtain a system of $(2l + 1)$ coupled linear differential equations of first order:

$${\rm i}\frac{\partial a_{M_l}(t)}{\partial t} = \sum_{M_k=-l}^{l} a_{M_k}(t)\langle M_l|V_{\rm eff}|M_k\rangle. \tag{33}$$

We have to solve this system for the initial conditions:

$$a_{M_l}(-\infty) = \delta(M_i, M_l), \tag{34}$$

where δ is the Kronecker symbol and

$$\langle M_l|S|M_i\rangle = \langle M_i|S|M_l\rangle = a_{M_l}(+\infty). \tag{35}$$

Thus the system has to be solved $(2l + 1)$ times for obtaining all the elements of the S-matrix for the (nl) subspace.

For the calculations, two frames of reference are used. The first one is the atomic frame in which the perturbed atom is stationary at the origin, the quantization axis is taken as perpendicular to the collision plane $(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{v})$ and the second one is the rotating or molecular frame in which the interatomic axis is taken as the quantization axis. These reference frames are shown in Fig. 2. This choice of frames gives the simplest relationship between states quantized relative to the atomic and the rotating frames respectively (Roueff 1974).

The interaction potential V has a cylindrical symmetry about the internuclear axis (OZ) and so $V_{\rm eff}$ is diagonal in the rotating frame.

A transformation of the angular momentum states from the atomic basis to the rotating frame is achieved by using the rotations matrices (Messiah 1961). The Euler angles are given by $(\beta, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ and Eq. (33) becomes

$$\mathrm{i}\frac{\partial a_{M_l}(t)}{\partial t} = \sum_{M_k M_k'} \mathcal{D}^{(l)}_{M_l M_k'} \mathcal{D}^{\dagger(l)}_{M_l M_k'} a_{M_k}(t) \langle M_l | V_{\mathrm{eff}} | M_l \rangle \tag{36}$$

when $\mathcal{D}$ is the rotation operator.

For a given quantum number l we obtain $(2l+1)$ coupled differential equations. These coupled equations must be solved for obtaining the $(2l+1)^2$ S-matrix elements.

The interaction matrix is Hermitian and the S-matrix is unitary and symmetric. If the quantization axis is perpendicular to the collision plane the selection rules are: $\Delta m_l = \pm 2, \pm 4 \ldots$. This rule will disappear when we take an average over all possible orientations of the collision plane, since the collisions are isotropic.

6. Depolarization calculations for $l = 1$

Let us consider collisions between an atom in an $l = 1$ state and hydrogen in its ground state 1s. The state of the system during the collision becomes explicitly:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle = {} & a_1(t)|11\rangle|00\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, E_1^0\, t} + a_0(t)|10\rangle|00\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, E_0^0\, t} \\ & + a_{-1}(t)|1-1\rangle|00\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, E_{-1}^0\, t} \end{aligned} \tag{37}$$

and the coupled differential equations become (Anstee & O'Mara 1991):

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\frac{\partial a_1(t)}{\partial t} &= a_1(t) V_+ + \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\beta} a_{-1}(t) V_- \\ \mathrm{i}\frac{\partial a_0(t)}{\partial t} &= a_0(t) \langle 1 | V_{\mathrm{eff}} | 1 \rangle \\ \mathrm{i}\frac{\partial a_{-1}(t)}{\partial t} &= a_{-1}(t) V_+ + \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\beta} a_1(t) V_- \end{aligned} \tag{38}$$

where:

$$V_\pm = \frac{1}{2}\left(\langle 1 | V_{\mathrm{eff}} | 1 \rangle \pm \langle 0 | V_{\mathrm{eff}} | 0 \rangle\right). \tag{39}$$

The equations are integrated with a Runge-Kutta-Merson routine and then we obtain the transition matrix elements in the $|\alpha l m_l\rangle$ basis for a given velocity and impact-parameter.

We recall that we need, for depolarization calculations, the T-matrix elements in the $|\alpha J M_J\rangle$ basis. Since the spin is neglected, the S-matrix is diagonal in S and its elements do not depend on M_S. Following Eq. (20) we obtain:

$$\begin{aligned} \langle \alpha J M_J | T | \alpha J M_J' \rangle = {} & \sum_{m_l, m_l', M_S} (-1)^{2S-2l+M_J+M_J'} (2J+1) \\ & \times \begin{pmatrix} S & l & J \\ M_S & m_l & -M_J \end{pmatrix} \\ & \times \begin{pmatrix} S & l & J \\ M_S & m_l' & -M_J' \end{pmatrix} \langle \alpha l m_l | T | \alpha l m_l' \rangle. \end{aligned} \tag{40}$$

The matrix elements $\langle \alpha J M_J | T | \alpha J M_J' \rangle$ are obtained in a basis where the quantization axis is perpendicular to the collision plane. We have now to perform an average of the transitions probabilities over all possible orientations since collisions are isotropic. This angular average is denoted by $\langle \quad \rangle_{\mathrm{av}}$.

Using formula (16) by Sahal-Bréchot (1973), it can be shown that, in the irreducible tensorial operator basis, the angular average of the depolarization transition probability is given by:

$$\begin{aligned} \langle P^k(\alpha J, b, v) \rangle_{\mathrm{av}} = {} & \frac{1}{2J+1} \sum_{\mu, \mu'} |\langle \alpha\ J\ \mu | T | \alpha\ J\ \mu' \rangle|^2 \\ & - \sum_{\mu, \mu', \nu, \nu'} \langle \alpha\ J\ \mu | T | \alpha\ J\ \mu' \rangle \langle \alpha\ J\ \nu | T | \alpha\ J\ \nu' \rangle^* \\ & \times \sum_{\chi} (-1)^{2J+k+\mu-\mu'} \begin{pmatrix} J & J & k \\ -\nu' & \mu' & \chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & J & k \\ \nu & -\mu & -\chi \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{41}$$

Owing to the selection rules on the $3j$-coefficients, the summation over χ is reduced to a single term, since $\chi = -(\mu' - \nu') = -(\mu - \nu)$.

The depolarization cross section may then be computed from:

$$\sigma^k(\alpha J, v) = 2\pi \int_0^\infty \langle P^k(\alpha J, b, v) \rangle_{\mathrm{av}}\, b\, \mathrm{d}b. \tag{42}$$

At small impact-parameters, the $\langle P^k(\alpha J, b, v) \rangle_{\mathrm{av}}$ values become highly oscillatory, and it is impractical to integrate numerically. In addition, at these separations the perturbation theory breaks down and the calculated RSU potentials become invalid. Thus, an impact-parameter cutoff is used (Anstee & O'Mara 1991):

$$\sigma^k(\alpha J, v) \simeq \pi b_0^2 + 2\pi \int_{b_0}^\infty \langle P^k(\alpha J, b, v) \rangle_{\mathrm{av}}\, b\, \mathrm{d}b. \tag{43}$$

Integration over the velocity distribution for a temperature T can be performed to obtain the depolarization rate which is given by:

$$\begin{aligned} D^k(\alpha J, T) \simeq n_{\mathrm{H}} \int_0^\infty v f(v) \mathrm{d}v \Bigg(& \pi b_0^2 \\ & + 2\pi \int_{b_0}^\infty \langle P^k(\alpha J, b, v) \rangle_{\mathrm{av}}\, b\, \mathrm{d}b \Bigg) \end{aligned} \tag{44}$$

where b_0 is the cutoff impact-parameter and here $b_0 = 3a_0$ as in Anstee & O'Mara (1991) (see Sect. 8).

7. Results

7.1. Our results for $^1P_1$ and $^2P_{3/2}$ levels

The perturbed atom is modelled as a single valence electron outside a spherical ionic core. If the energy of the state $|\alpha l\rangle$ of the valence electron is denoted by $E_{\alpha l}$ and the binding energy of the ground state by E_∞, the binding energy of the level $|\alpha l\rangle$ is $(E_\infty - E_{\alpha l})$ and is related to the effective principal quantum number by $n^* = [2(E_\infty - E_{nl})]^{-1/2}$.

For example: consider the case of the neutral calcium line 4227 Å (transition $4s^2$–$4s4p$). The energy of the 4p level and the binding energy are ≃0.1077 a.u. (~23652 cm^{-1}) and ≃0.2245 a.u. (49305.72 cm^{-1}) respectively

Table 2. Variation of the depolarization cross section, for a relative velocity of 10 km s^{-1}, with effective principal quantum number. Cross sections are in atomic units.

n^*	$\sigma^1(\alpha 1)$	$\sigma^2(\alpha 1)$	$\sigma^1(\alpha\frac{3}{2})$	$\sigma^2(\alpha\frac{3}{2})$	$\sigma^3(\alpha\frac{3}{2})$
1.5	203	192	79	141	134
1.6	233	228	90	165	157
1.7	276	258	100	187	176
1.8	323	301	114	217	203
1.9	377	349	130	252	233
2	438	405	147	290	268
2.1	507	466	167	334	307
2.2	581	533	189	381	349
2.3	663	605	212	432	393
2.4	751	683	237	487	442
2.5	849	769	266	549	496
2.6	949	869	295	616	562
2.7	1058	970	327	685	627
2.8	1180	1075	362	761	691
2.9	1299	1176	396	835	753
3	1423	1282	431	911	817

Table 3. Velocity exponents $\lambda^k(\alpha J)$ corresponding to the cross sections of Table 2.

n^*	$\lambda^1(\alpha 1)$	$\lambda^2(\alpha 1)$	$\lambda^1(\alpha\frac{3}{2})$	$\lambda^2(\alpha\frac{3}{2})$	$\lambda^3(\alpha\frac{3}{2})$
1.5	0.269	0.256	0.201	0.246	0.240
1.6	0.270	0.257	0.207	0.246	0.234
1.7	0.265	0.247	0.211	0.244	0.235
1.8	0.259	0.249	0.213	0.242	0.240
1.9	0.256	0.242	0.215	0.240	0.234
2	0.251	0.235	0.216	0.237	0.235
2.1	0.253	0.237	0.220	0.235	0.218
2.2	0.248	0.235	0.219	0.232	0.223
2.3	0.246	0.235	0.221	0.231	0.221
2.4	0.242	0.231	0.220	0.230	0.225
2.5	0.240	0.224	0.221	0.228	0.224
2.6	0.242	0.227	0.223	0.228	0.220
2.7	0.241	0.223	0.224	0.228	0.226
2.8	0.244	0.226	0.228	0.230	0.223
2.9	0.249	0.223	0.221	0.230	0.208
3	0.243	0.229	0.229	0.2208	0.225

(Wiese et al. 1969). Hence the effective principal quantum number is $n^* \simeq 2.077$.

Note that if the parent configuration of the level is not the same as that of the ground state, this should be accounted for by using the appropriate series limit for the excited parent configuration instead of the ground state binding energy. A particular example was explained in detail by Barklem et al. (1998) (see also Barklem et al. 2000). As in Anstee & O'Mara (1991), we can calculate the cross sections as a function of n^*. Table 2 gives $\sigma^k(\alpha 1, v)$ and $\sigma^k(\alpha\frac{3}{2}, v)$ as a function of n^* for a typical relative velocity $v = 10$ km s^{-1}.

We thus can obtain the depolarization cross section for any level of any atom by interpolation of the values given in Table 2 for the appropriate n^* value for the state of interest. We notice that the dependence of cross sections on velocity is very close to

$$\sigma^k(\alpha J, v) = \sigma^k(\alpha J, v_0)\left(\frac{v}{v_0}\right)^{-\lambda^k(\alpha J)}, \tag{45}$$

where v_0 is the velocity at which the cross section is known (10 km s^{-1}). Table 3 shows the so-called velocity exponent $\lambda^k(\alpha J)$ (Anstee & O'Mara 1991). In order to obtain the depolarization cross section for any velocity v from Tables 2 and 3 Eq. (45) can be used.

Figures 3 and 4 display the depolarization cross sections (computed directly) and the corresponding depolarization rates for the CaI 4p ^{1}P$_1$($n^* \simeq 2.077$), MgI 3p ^{1}P$_1$($n^* \simeq 2.030$) and the NaI 3p ^{2}P$_{3/2}$($n^* \simeq 2.117$) states.

To obtain the depolarization rates we must integrate over the Maxwell distribution of velocities. Using Eq. (44), it can be shown that for a mean velocity $\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi\mu}}$, the depolarization rates can be expressed as (Anstee & O'Mara 1991)

$$D^k(\alpha J, T) = \left(\frac{4}{\pi}\right)^{(\frac{1}{2}\lambda^k(\alpha J))} \Gamma\left(2 - \frac{1}{2}\lambda^k(\alpha J)\right) v_0 \sigma^k(\alpha J, v_0) \times \left(\frac{\bar{v}}{v_0}\right)^{1-\lambda^k(\alpha J)}. \tag{46}$$

Since $f(v)$ depends on the reduced mass μ, the depolarization rate is specific to a given atom. In order to obtain depolarization rates for any level of any atom by simple interpolation we applied the approximation: $\mu = m_{\rm H}$, $m_{\rm H}$ being the hydrogen mass. We verified that this approximation introduces a less than 4% error in the depolarization rates.

Table 4 gives the alignment depolarization rates as a function of n^* for the temperatures of 5000 K and 6000 K.

7.2. Comparison with other methods

In Fig. 5 we compare our alignment depolarization rates with quantum chemistry depolarization rates (Kerkeni 2002) and the alignment depolarization rates obtained by replacing the RSU potential by the Van der Waals potential, $V = -\frac{C_6}{R^6}$, where C_6 is the Van der Waals constant.

We display only the $k = 2$ case which is related to the linear depolarization (alignment). Our results show rather good agreement with quantum chemistry calculations. However, the Van der Waals potential underestimates the depolarization cross section. To explain this we now examine the sensitivity of the depolarization cross section to the RSU potential.

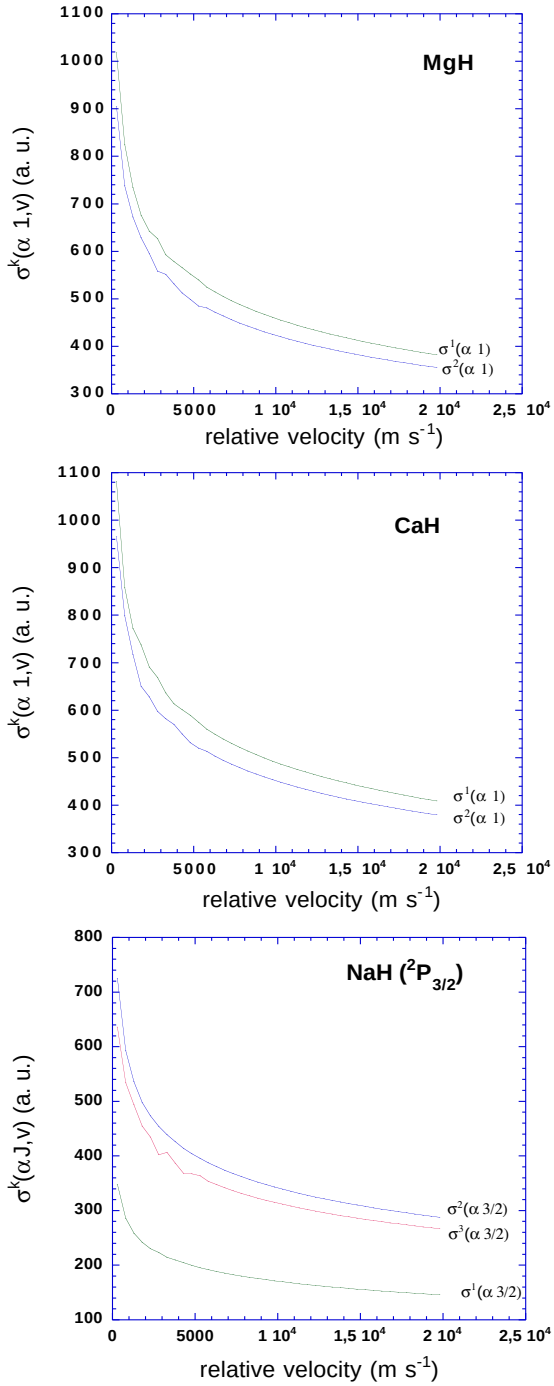

Fig. 3. Depolarization cross sections as a function of relative velocity.

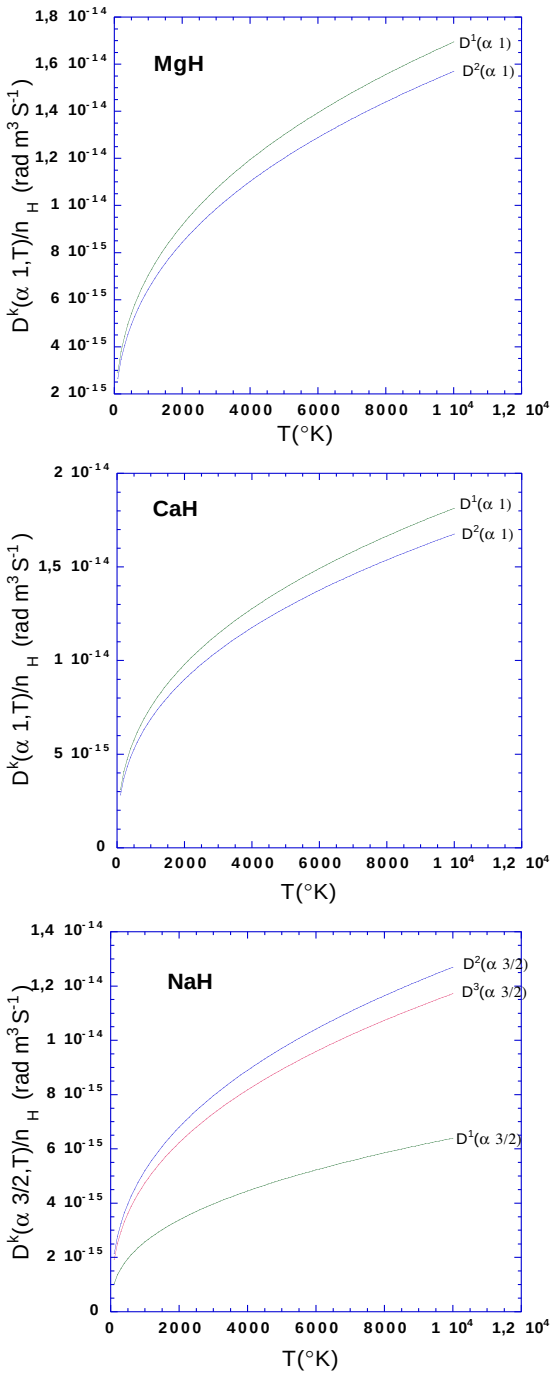

Fig. 4. Depolarization rates as a function of temperature.

8. Dependence of depolarization cross sections on potentials

As a first check on the sensitivity of the results to the nature of the potential we introduce a localised perturbation to the interaction potential. We have chosen the case CaI 4p for the check. The interaction potential is multiplied by a Gaussian magnification factor of the form (Anstee & O'Mara 1991)

$$G(R) = 1 + \exp\left(-(R - R_0)^2\right). \tag{47}$$

The σ-symmetry interaction (1s, 4pσ) is more important than the π-symmetry interaction (1s, 4pπ). Therefore only the

Table 4. Depolarization rates for $l = 1$. Each column: $S = 0$ and $J = 1$; $S = \frac{1}{2}$ and $J = \frac{3}{2}$ for $T = 5000$ K and $T = 6000$ K, as a function of n^*. Depolarization rates are given in 10^{-14} rad. m^3 s^{-1}.

	$T = 5000$ K		$T = 6000$ K	
n^*	$D^2(\alpha 1)/n_H$	$D^2(\alpha \frac{3}{2})/n_H$	$D^2(\alpha 1)/n_H$	$D^2(\alpha \frac{3}{2})/n_H$
1.5	0.5338	0.3931	0.5705	0.4206
1.6	0.6135	0.4477	0.6556	0.4789
1.7	0.7188	0.5220	0.7679	0.5585
1.8	0.8363	0.6047	0.8944	0.6470
1.9	0.9716	0.7000	1.0395	0.7492
2.	1.1260	0.8084	1.2050	0.8653
2.1	1.2971	0.9289	1.3885	0.9944
2.2	1.4844	1.0599	1.5891	1.1349
2.3	1.6875	1.2021	1.8066	1.2872
2.4	1.9043	1.3563	2.0390	1.4523
2.5	2.1452	1.5270	2.2982	1.6352
2.6	2.4065	1.7086	2.5774	1.8297
2.7	2.6814	1.9010	2.8709	2.0348
2.8	2.9634	2.1015	3.1695	2.2469
2.9	3.2665	2.3097	3.5001	2.4707
3.	3.5842	2.5237	3.8410	2.6992

(1s, 4pσ) interaction has been altered. R_0 is the position of the maximum perturbation.

Figure 6 shows the effect of the R_0 variation on the depolarization cross section for three different velocities. We remark that the enhancement effect on the cross section shows a peak in the intermediate range ($10a_0 \leq R_0 \leq 18a_0$). We conclude that the depolarization cross section depends most strongly on the intermediate region of the potential. It is for this reason that the Van der Waals interaction potential, which is inaccurate in this intermediate region, underestimates the depolarization cross sections.

To study the sensitivity of the cross section to close collisions, a second check is made. We have calculated the alignment cross sections by varying the cutoff b_0 in Eq. (43). Figure 7 shows the effect of the cutoff variation at $v = 10$ km s^{-1} and $v = 30$ km s^{-1}. For $b_0 < 8a_0$ the cutoff variation does not have any effect on the cross section calculations.

Therefore it can be concluded that short-range collisions which involve ionic and exchange interactions do not influence the depolarization cross sections and hence the depolarization rates. The principal differences between the RSU potentials and those from quantum chemistry occur at small interatomic separations. Since the important impact-parameters are at medium interatomic distances, this explains why we obtain a rather good agreement between the ABO and quantum chemistry results. However, a more detailed study would be desirable but is outside the scope of the present paper because the exact quantum chemistry potentials are needed for quantitative comparison.

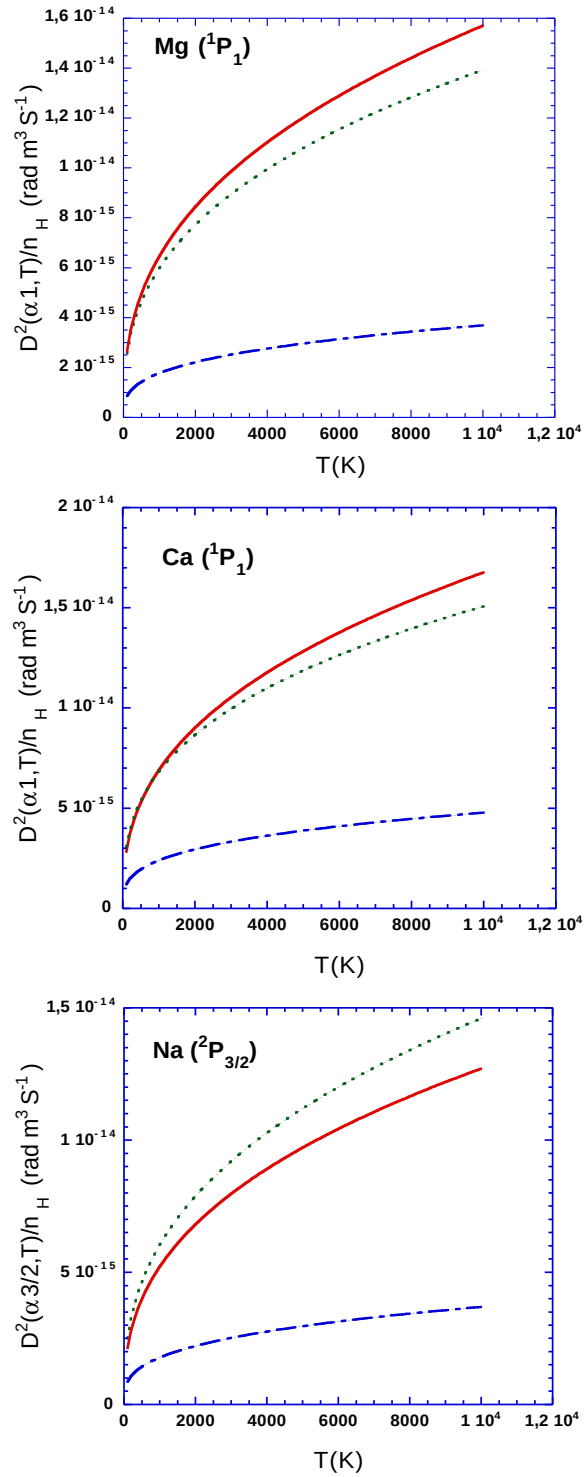

Fig. 5. Depolarization rates for $k = 2$ as a function of temperature. Full lines: our results; dotted lines: quantum chemistry calculations (Kerkeni 2002); dot-dashed lines Van der Waals approximation.

9. Conclusion

In conclusion, we have shown that the ABO theory is a powerful tool for quickly calculating a great number of depolarization

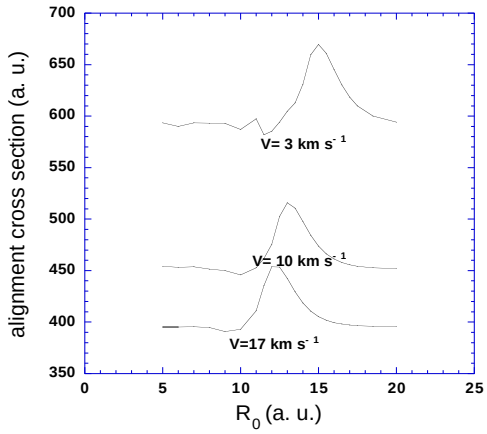

Fig. 6. Depolarization cross section enhancement due to a Gaussian local perturbation of the potential. Cross sections are calculated for the relative velocities: 3 km s^{-1}, 10 km s^{-1} and 17 km s^{-1} .

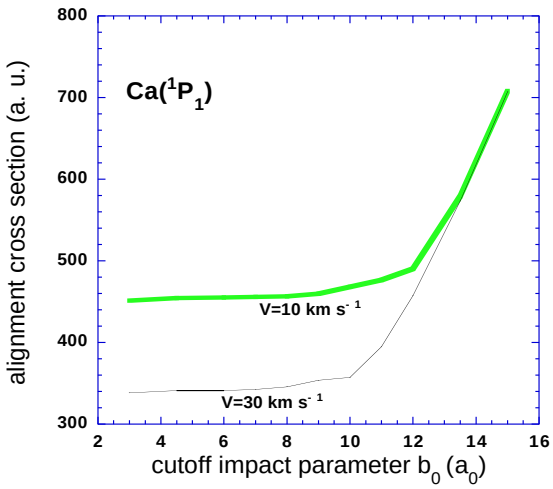

Fig. 7. Behaviour of the depolarization cross sections from Eq. (43) with the cut-off b_0. For a relative velocities v = 10 km s^{-1} and v = 30 km s^{-1}.

cross sections for collisions with atomic hydrogen in the physical conditions of the solar atmosphere. The present paper is limited to p states for testing the method. Comparison with quantum chemistry results gives us the conviction that it would be useful to extend our calculations to higher l-values which are also of importance for solar line polarization. Although less accurate than quantum chemistry calculations, an extension to heavy atoms and higher l-values is easier and faster within the present semi-classical method. We will also extend our semi-classical theory to depolarization cross sections by collisions with singly ionized atoms. This will be the subject of further papers.

Acknowledgements. This paper is dedicated to Jim O'Mara's memory, who followed with interest the progress of the present work and suddenly passed away on April 27, 2002. The authors thank the referee for valuable suggestions which improved the presentation of this work. We are indebted to B. Kerkeni who has communicated a number of her results before publication.

References

Ackermann, H. 1966, Colloques Internationaux du CNRS (Paris, France: Éditions du CNRS), 164, 82
Anstee, S. D., & O'Mara, B. J. 1991, MNRAS, 253, 549
Anstee, S. D. 1992, Ph.D. Thesis, Univ. Queensland
Anstee, S. D., & O'Mara, B. J. 1995, MNRAS, 276, 859
Anstee, S. D., O'Mara, B. J., & Ross, J. E. 1997, MNRAS, 284, 202
Barklem, P. S., & O'Mara, B. J. 1997, MNRAS, 290, 102
Barklem, P. S., O'Mara, B. J., & Ross, J. E. 1998, MNRAS, 296, 1057
Barklem, P. S. 1998, Ph.D. Thesis, Univ. Queensland
Barklem, P. S., Anstee, S. D., & O'Mara, B. J. 1998, PASA 15, 336
Barklem, P. S., Piskunov, N., & O'Mara, B. J. 2000, A&A, 142, 467
Bommier, V., & Sahal-Bréchot, S. 1982, Sol. Phys., 78, 157
Bommier, V., & Molodij, G. 2002, A&A, 381, 241
Brueckner, K. A. 1971, ApJ, 169, 621
Fano, U., & Racah, G. 1959, Irreducible Tensorial Sets (New York; Academic Press)
Fano, U. 1963, Phys. Rev., 131, 259
Gangrsky, Yu. P., Karaivanov, D. V., Marinova, K. P., et al. 1998, Eur. Phys. J. A, 3, 313
Gaupp, A., Kuske, P., & Andra, H. J. 1982, Phys. Rev. A, 26, 3351
Gordeyev, E. P., Nikitin, E. E., & Ovchinnikova, M. Ya. 1969, Can. J. Phys., 47, 1819
Kerkeni, B., Spielfiedel, A., & Feautrier, N. 2000, A&A, 358, 373
Kerkeni, B. 2002, A&A, 390, 791
Kerkeni, B., & Bommier, V. 2002, A&A, 394, 707
Messiah, A. 1961, Mécanique Quantique (Paris: Dunod)
O'Mara, B. J. 1976, MNRAS, 177, 551
Omont, A. 1977, Prog. Quan. Elec., 5, 69
Roueff, E. 1974, J. Phys. B, 7, 185
Roueff, E., & Suzor, A. 1974, J. Phys. B, 35, 727
Sahal-Bréchot, S. 1973, A&A, 32, 147
Sahal-Bréchot, S. 1977, ApJ, 213, 887
Seaton, M. J. 1958, MNRAS, 118, 504
Stenflo, J. O., & Keller, C. U. 1997, A&A, 321, 927
Unsöld, A. L. 1927, Z. Phys., 43, 574
Unsöld, A. L. 1955, Physik der Stern Atmosphären (Zweite Auflage)
Wiese, W. L., Smith, M. W., & Miles, B. M. 1969, Atomic Transition Probabilities - Sodium through Calcium. US Dept. of Commerce, National Bureau of Standards, Washington

A&A 409, 369–373 (2003)
DOI: 10.1051/0004-6361:20031058
© ESO 2003

Astronomy & Astrophysics

Collisional depolarization and transfer rates of spectral lines by atomic hydrogen

II. Application to d states of neutral atoms

M. Derouich[1], S. Sahal-Bréchot[1], and P. S. Barklem[2]

[1] Observatoire de Paris-Meudon, LERMA UMR CNRS 8112, 5 place Jules Janssen, 92195 Meudon Cedex, France
[2] Department of Astronomy and Space Physics, Uppsala University, Box 515, S 751 20 Uppsala, Sweden
e-mail: Moncef.Derouich@obspm.fr

Received 28 April 2003 / Accepted 20 June 2003

Abstract. The theory of collisional depolarization of spectral lines by atomic hydrogen (Derouich et al. 2003) is extended to d ($l = 2$) atomic levels. Depolarization rates, polarization and population transfer rates are calculated and results are given as a function of the temperature. Cross sections as a function of the effective quantum number for a relative velocity of 10 km s^{-1} are also given together with velocity exponents λ, if they exist, with the assumption that the cross section varies with velocity as $v^{-\lambda}$. A discussion of our results is presented.

Key words. Sun: atmosphere – atomic processes – line: formation – polarization

1. Introduction

In stellar atmospheres, isotropic collisions with the particles of the medium are responsible for a part of the broadening of spectral lines. If a polarizing effect creates an atomic polarization of the lines, they can decrease or even destroy this atomic polarization. Spectral lines observed at the solar limb are linearly polarized by anisotropic scattering of the incident solar radiation. Isotropic collisions with the particles of the medium depolarize the lines. In the solar photosphere and the low chromosphere, depolarizing collisions are dominated by isotropic collisions with hydrogen atoms. When these depolarizing collisions dominate over any other radiative (or collisional) polarizing effects, the atomic levels become depolarized. Therefore depolarization rates, polarization and population transfer rates by collisions with hydrogen are needed in order to interpret the observed polarization.

In Derouich et al. (2003), referred to hereafter as Paper I, a semi-classical theory for depolarization of neutral atomic lines by collisions with atomic hydrogen has been developed and applied to p ($l = 1$) atomic states. This theory is an extension to collisional depolarization of the theory developed in the 1990s by O'Mara and collaborators (Anstee 1992; Anstee & O'Mara 1991, 1995; Anstee et al. 1997; Barklem 1998; Barklem & O'Mara 1997; Barklem et al. 1998) for line broadening by collisions with atomic hydrogen. The present paper is an extension of this theory to d ($l = 2$) atomic levels. In fact, this paper presents the first calculations of the depolarization and the collisional transfer rates for d-atomic states.

A great advantage of the present method is that calculations are not specific for a given perturbed atom. The transition matrix T may be calculated using Coulomb wavefunctions for the valence electron of the perturbed atom and is simply dependent on the effective principal number n^* and the orbital angular momentum quantum number l ($l = 2$ for d-atomic states). Therefore we can calculate depolarization cross sections, polarization and population transfer cross sections for any level of any atom, allowing computation for complex atoms. This is very useful for interpreting the so-called "second solar spectrum" (Stenfo & Keller 1997), where depolarization rates for many levels are needed (Manso Sainzo & Landi Degl'Innocenti 2002).

An extension of our theory to higher l-values, aimed at a more complete interpretation of the second solar spectrum, will be the subject of further papers.

2. Description of the problem and summary of Paper I

In our collision problem, the perturbed atoms collide with a bath of perturbing hydrogen atoms. The hydrogen atom is assumed to remain in its ground state during the collision. The internal states of the perturbed atom are described by the spherical tensor components ${}^{nlJ}\rho^k_q$ of the density matrix. Due to the

Send offprint requests to: M. Derouich,
e-mail: moncef.derouich@obspm.fr

isotropy of the collisions, the depolarization rates, polarization and population transfer rates are q-independent. The contribution of the isotropic collisions to the statistical equilibrium equations is:

$$\left(\frac{\mathrm{d}\,{}^{nlJ}\rho_0^k}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{coll}} = -D^k(nlJ,T)\,{}^{nlJ}\rho_0^k + \sum_{J\neq J'} D^k(nlJ\to nlJ',T)\,{}^{nlJ'}\rho_0^k + \text{quenching term}, \quad (1)$$

where $D^k(nlJ,T)$ is the collisional depolarization rate for the statistical tensor of rank k. Each level of total angular momentum J relaxes with $2J+1$ independent depolarization rates. In particular $D^0(nlJ,T)$ is the destruction rate of population, $D^1(nlJ,T)$ is the destruction rate of orientation (circular atomic polarization) and $D^2(nlJ,T)$ is the destruction rate of alignment which is of interest in the understanding of the second solar spectrum.

We assume that inelastic collisions with hydrogen perturbers do not alter the total population of an atomic level (nlJ). This is the so-called no-quenching approximation. The no-quenching approximation implies that

$$D^0(nlJ,T) = \sum_{J\neq J'} \zeta(nlJ\to nlJ',T) = 0, \quad (2)$$

where $\zeta(nlJ\to nlJ',T)(J\neq J')$ is the inelastic collisional rate. The expression for the depolarization rate $D^k(nlJ,T)$ is given in Paper I.

If the quenching must be taken into account, $D^k(nlJ\to nlJ',T)$ corresponds to collisional transfer of population ($k=0$), orientation ($k=1$) and alignment ($k=2$). $D^k(nlJ\to nlJ',T)$ can be written as a linear combination of the collisional transition rates between the fine stucture sublevels $\zeta(nlJM_J\to nlJ'M'_J,T)(J\neq J')$ (Sahal-Bréchot 1977):

$$D^k(nlJ\to nlJ',T) = (2k+1)\sum_{M_J,M'_J}(-1)^{J+J'-M_J-M'_J} \times\begin{pmatrix} J & k & J\\ -M_J & 0 & M_J\end{pmatrix}\begin{pmatrix} J' & k & J'\\ -M'_J & 0 & M'_J\end{pmatrix} \times\zeta(nlJM_J\to nlJ'M'_J,T). \quad (3)$$

The expressions between parentheses denote $3j$-coefficients (Messiah 1961).

In particular one obtains

$$D^0(nlJ\to nlJ',T) = \sqrt{\frac{2J+1}{2J'+1}}\,\zeta(nlJ\to nlJ',T), \quad (4)$$

where

$$\zeta(nlJ\to nlJ',T) = \frac{1}{2J+1}\sum_{M_J,M'_J}\zeta(nlJM_J\to nlJ'M'_J,T), \quad (5)$$

is the collisional transition rate between fine structure levels. $\zeta(\alpha JM_J\to\alpha JM'_J,T)$ is the collisional transition rate between the sublevels $|\alpha JM_J\rangle\to|\alpha JM'_J\rangle$. It can be written as a function of the local temperature T and the hydrogen perturber local density n_{H} (Paper I):

$$\zeta(\alpha JM_J\to\alpha JM'_J,T) = n_{\mathrm{H}}\int_0^\infty\int_0^\infty 2\pi b\,\mathrm{d}b\,v\,f(v)\,\mathrm{d}v \times|\langle\alpha JM_J|I-S(b,v)|\alpha JM'_J\rangle|^2, \quad (6)$$

where I is the unit matrix and $T=I-S$ is the so-called transition matrix depending on the impact-parameter b and relative velocity v. Then the collisional depolarization rates and the collisional transfer rates can be expressed in terms of the S-matrix elements for the collision which are functionally dependent on the interaction energy of hydrogen in its ground state with the perturbed atom. The essential difference between various theoretical computations of the depolarization and collisional transfer rates is in the method employed to determine the interaction energy and to determine the S-matrix.

3. Method

Consider a collision between a perturbed atom in a $l=2$ state and hydrogen in its ground state 1s. The perturbed atom is described by an optical electron outside a positively charged core. The effective principal number is given by $n^*=[2(E_\infty-E_{nl})]^{-1/2}$. E_{nl} is the energy of the state of the valence electron and E_∞ is the appropriate series limit for the parent configuration of the perturbed atom state. As in the p atomic levels case (Paper I), depolarizing collisions are due essentially to intermediate-range isotropic interactions between radiating and hydrogen atoms. The so-called Rayleigh-Schrödinger-Unsöld (RSU) interaction potential, used in this work, is of semi-classical nature and is totally electrostatic. For more details we refer to Paper I and to the ABO papers (Anstee 1992; Anstee & O'Mara 1991, 1995; Anstee et al. 1997; Barklem 1998; Barklem & O'Mara 1997; Barklem et al. 1998). We use the notation of Paper I in the following analysis.

Inelastic collisions which leave the radiating atom in a final state ($n'l'$) different from the initial one (nl) are neglected. Thus we consider only the $(2l+1)$ states of the subspace (nl). Since potentials are computed in the rotating frame (Paper I), which is obtained from the fixed laboratory frame by means of the geometrical rotation $R(\beta,\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2})$, the interaction potential is diagonal. The $(2l+1)$ RSU potential elements calculated here are (Anstee & O'Mara 1992)

$$V_{\mathrm{eff},m_l} = {}_{(\mathrm{H})}\langle 100|_{(A)}\langle nlm_l|V_{\mathrm{eff}}|nlm_l\rangle_{(A)}|100\rangle_{(\mathrm{H})} = \langle M_l|V|M_l\rangle - \frac{1}{E_{\mathrm{p}}}(\langle M_l|V|M_l\rangle)^2 + \frac{1}{E_{\mathrm{p}}}\int_0^{+\infty} P^2_{n^*l}I_{l|m_l|}(R,p_2)\mathrm{d}p_2, \quad (7)$$

in atomic units which are used hereafter. Here $|M_l\rangle = |nlm_l\rangle_{(A)}|100\rangle_{(\mathrm{H})}$, $I_{l|m_l|}$ are lengthy complicated analytic functions and $E_{\mathrm{p}}=-4/9$ is adopted. P_{n^*l} is the Coulomb radial wave function for the valence electron of the perturbed atom with quantum defect $\delta=n-n^*$.

The total wavefunction $|\psi\rangle$ of the system (atom+perturber) is taken as the product of the wave function $|\psi\rangle_{(A)}$ of the

perturbed atom and that of hydrogen in its ground state $|100\rangle_{(\mathrm{H})}$:

$$|\psi\rangle = |\psi\rangle_{(A)}|100\rangle_{(\mathrm{H})}, \tag{8}$$

and is developed over the basis formed by the products of the separated atoms states $|M_l\rangle$:

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \sum_{M_l} a_{M_l}(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E^0_{M_l}t}\left|M_l\right\rangle \tag{9}$$

where $E^0_{M_l}$ is the eigenenergy of the system made-up of the two isolated atoms.

The semi-classical coupled linear differential equations are obtained from the time-dependent Schrödinger equation. The transformation from the rotating to the fixed laboratory frame is included following Roueff (1974). For d-states, the coupled differential equations become explicitly (Barklem & O'Mara 1997):

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\frac{\partial a_{-2}(t)}{\partial t} &= \frac{1}{8}a_{-2}(t)(3V_{\mathrm{eff},0} + 4V_{\mathrm{eff},1} + V_{\mathrm{eff},2}) \\
&\quad + \frac{3}{4\sqrt{6}}a_0(t)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\beta}(-V_{\mathrm{eff},0} + V_{\mathrm{eff},2}) \\
&\quad + \frac{1}{8}a_2(t)\mathrm{e}^{-4\mathrm{i}\beta}(3V_{\mathrm{eff},0} - 4V_{\mathrm{eff},1} + V_{\mathrm{eff},2}) \\
\mathrm{i}\frac{\partial a_{-1}(t)}{\partial t} &= \frac{1}{2}a_{-1}(t)(V_{\mathrm{eff},1} + V_{\mathrm{eff},2}) \\
&\quad + \frac{1}{2}a_1(t)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\beta}(-V_{\mathrm{eff},1} + V_{\mathrm{eff},2}) \\
\mathrm{i}\frac{\partial a_0(t)}{\partial t} &= \frac{3}{4\sqrt{6}}a_{-2}(t)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\beta}(-V_{\mathrm{eff},0} + V_{\mathrm{eff},2}) \\
&\quad + \frac{3}{4\sqrt{6}}a_2(t)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\beta}(-V_{\mathrm{eff},0} + V_{\mathrm{eff},2}) \\
&\quad + \frac{1}{4}a_0(t)(V_{\mathrm{eff},0} + 3V_{\mathrm{eff},2}) \\
\mathrm{i}\frac{\partial a_1(t)}{\partial t} &= \frac{1}{2}a_{-1}(t)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\beta}(-V_{\mathrm{eff},1} + V_{\mathrm{eff},2}) \\
&\quad + \frac{1}{2}a_1(t)(V_{\mathrm{eff},1} + V_{\mathrm{eff},2}) \\
\mathrm{i}\frac{\partial a_2(t)}{\partial t} &= \frac{1}{8}a_{-2}(t)\mathrm{e}^{4\mathrm{i}\beta}(3V_{\mathrm{eff},0} - 4V_{\mathrm{eff},1} + V_{\mathrm{eff},2}) \\
&\quad + \frac{3}{4\sqrt{6}}a_0(t)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\beta}(-V_{\mathrm{eff},0} + V_{\mathrm{eff},2}) \\
&\quad + \frac{1}{8}a_2(t)(3V_{\mathrm{eff},0} + 4V_{\mathrm{eff},1} + V_{\mathrm{eff},2}).
\end{aligned} \tag{10}$$

Having the interaction potential V_{eff}, after integration of these equations, we obtain the transition matrix elements in the $|nlm_l\rangle$ basis for a given velocity and impact parameter. The T-matrix elements in the $|nlJM_J\rangle$ basis, which are needed for the depolarization and collisional transfer rates calculations, are obtained from Eq. (21) of Paper I.

In the irreducible tensorial operator basis, the angular average over all possible directions of the collision plane of the depolarization transition probability is given in Paper I. That of the collisional transfer transition probability is given by:

$$\begin{aligned}
\langle P^k(nlJ \to nlJ', b, v)\rangle_{av} &= \sum_{\mu,\mu',\nu,\nu'} \langle nl\ J\ \mu|T|nl\ J'\ \mu'\rangle \\
&\quad \times \langle nl\ J\ \nu|T|nl\ J'\ \nu'\rangle^* \sum_{\chi}(-1)^{J-J'+\mu-\mu'} \\
&\quad \times \begin{pmatrix} J & J & k \\ \nu & -\mu & \chi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} J' & J' & k \\ \nu' & -\mu' & \chi \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{11}$$

Owing to the selection rules for the $3j$-coefficients, the summation over χ is reduced to a single term, since $\chi = -(\nu' - \mu') = -(\nu - \mu)$.

The depolarization rates $D^k(nlJ, T)$, and the polarization and population transfer rates $D^k(nlJ \to nlJ', T)$ follow from integration over the impact parameters and the velocities with a Maxwellian distribution (for more details see Paper I).

4. Results

In most cases, the behaviour of the cross sections with the relative velocity v obeys a power law of the form:

$$\begin{aligned}
&\sigma^k(nlJ \to nlJ', v)\,(J = J' \text{ and } J \neq J') = \\
&\quad \sigma^k(nlJ \to nlJ', v_0)\left(\frac{v}{v_0}\right)^{-\lambda^k(nlJ\to nlJ')},
\end{aligned} \tag{12}$$

where v_0 is a typical velocity where the cross section is calculated (10 km s^{-1}). In certain cases here, such behaviour was not obeyed (the cross section showed oscillations with velocity).

Table 1 gives the various cross sections as function of n^* for a relative velocity of 10 km s^{-1} and the corresponding velocity exponents $\lambda^k(nlJ \to nlJ')$, if the exponential behaviour was obeyed, are tabulated in Table 2. Then we can obtain the cross sections $\sigma^k(nlJ \to nlJ', v)$ for all velocities from Tables 1 and 2 using Eq. (12). Tables 1 and 2 can be interpolated for an appropriate n^* associated to a given observed line in order to obtain the needed depolarization cross sections and collisional transfer cross-sections. After integration over velocities of these cross-sections, we obtain the depolarization rates and the collisional transfer rates of the line studied.

For cross sections obeying Eq. (12), as in Anstee & O'Mara (1992), the depolarization and the collisional transfer rates can be expressed by:

$$\begin{aligned}
&D^k(nlJ \to nlJ', T)(J = J' \text{ and } J \neq J') = \\
&\left(\frac{4}{\pi}\right)^{\left(\frac{1}{2}\lambda^k(nlJ\to nlJ')\right)} \Gamma\left(2 - \frac{1}{2}\lambda^k(nlJ \to nlJ')\right) \\
&\times v_0\sigma^k(nlJ \to nlJ', v_0)\left(\frac{\bar{v}}{v_0}\right)^{1-\lambda^k(nlJ\to nlJ')}.
\end{aligned} \tag{13}$$

We can generalize this relationship, which is specific to a particular atom owing to its mass, by assuming that $\mu = m_{\mathrm{H}}$ (μ and m_{H} are the reduced and hydrogen mass respectively). This approximation introduces a very small error (Paper I).

As mentioned, in certain cases especially for transfer of linear polarization calculations, the cross sections do not show exponential behaviour with velocity and so λ is not reported

Table 1. Variation of the cross sections, for the relative velocity of 10 km s^{-1}, with the effective principal number. Cross sections are in atomic units.

n^*	$\sigma^2\left(n2\frac{3}{2}\right)$	$\sigma^2(n22)$	$\sigma^2\left(n2\frac{5}{2}\right)$	$\sigma^0\left(n2\frac{3}{2}\to n2\frac{5}{2}\right)$	$\sigma^2\left(n2\frac{3}{2}\to n2\frac{5}{2}\right)$
2.5	283	507	342	278	60
2.6	313	566	380	311	65
2.7	351	633	424	351	73
2.8	394	717	477	397	77
2.9	443	808	537	451	87
3	496	900	598	512	104
3.1	553	1008	666	578	116
3.2	628	1109	727	647	139
3.3	711	1210	800	711	163
3.4	812	1348	897	783	179
3.5	905	1470	964	847	190
3.6	1028	1621	1039	920	196
3.7	1108	1763	1106	961	183
3.8	1202	1910	1185	1004	195
3.9	1299	2066	1260	1079	206
4	1294	2191	1367	1117	232

Table 2. Velocity exponents $\lambda^k(nlJ \to nlJ')(J = J'$ and $J \neq J')$ corresponding to the cross sections of Table 1.

n^*	$\lambda^2\left(n2\frac{3}{2}\right)$	$\lambda^2(n22)$	$\lambda^2\left(n2\frac{5}{2}\right)$	$\lambda^0\left(n2\frac{3}{2}\to n2\frac{5}{2}\right)$	$\lambda^2\left(n2\frac{3}{2}\to n2\frac{5}{2}\right)$
2.5	0.207	0.258	0.268	0.259	0.172
2.6	0.223	0.260	0.269	0.258	0.184
2.7	0.222	0.253	0.268	0.259	0.233
2.8	0.200	0.253	0.271	0.257	0.209
2.9	0.214	0.261	0.270	0.253	0.177
3	0.210	0.265	0.280	0.249	0.148
3.1	0.185	0.273	0.282	0.245	-
3.2	0.168	0.274	0.284	0.257	-
3.3	0.153	0.255	0.280	0.267	0.194
3.4	0.137	0.253	0.285	0.279	0.238
3.5	0.140	0.258	0.304	0.286	0.306
3.6	0.131	0.247	0.315	0.272	0.394
3.7	0.175	0.257	0.330	0.249	0.446
3.8	0.179	0.250	0.303	0.234	0.479
3.9	0.208	0.283	0.322	0.237	0.399
4	0.172	0.262	0.296	0.226	0.448

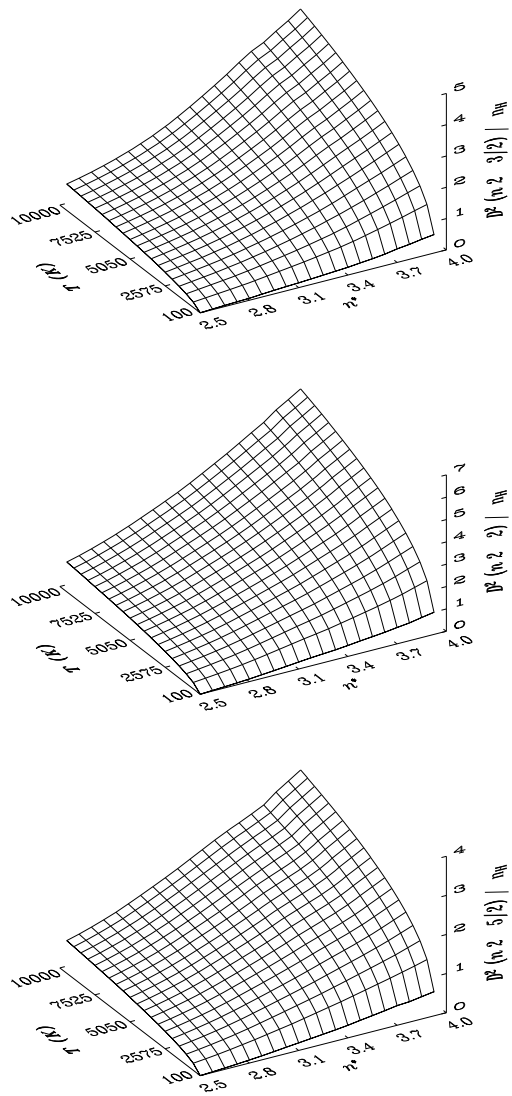

Fig. 1. Depolarization rates ($k = 2$), per unit H-atom density, as functions of temperature T and n^*. For $l = 2$, each figure: $S = \frac{1}{2}$ and $J = \frac{3}{2}$; $S = 0$ and $J = 2$; $S = \frac{1}{2}$ and $J = \frac{5}{2}$. Depolarization rates are given in 10^{-14} rad m^3 s^{-1}.

(Table 2). In these cases the linear polarization transfer rates must be computed by a numerical integration over computed cross sections obtained at different velocities.

Figure 1 shows the alignment depolarization rates ($k = 2$) as a function of the local temperature T and n^* for $l = 2$. The population transfer rates ($k = 0$) and the linear polarization transfer rates ($k = 2$) as a function of T and n^* are displayed in Figs. 2 and 3. All these rates increase with the temperature. For a temperature $T \leq 10\,000$ K, the destruction rate of alignment $D^2(n\ 2\ 3/2)/n_{\rm H} \leq 6 \times 10^{-14}$ rad m^3 s^{-1}, $D^2(n\ 2\ 2)/n_{\rm H} \leq 8 \times 10^{-14}$ rad m^3 s^{-1} and $D^2(n\ 2\ 5/2)/n_{\rm H} \leq 5\times10^{-14}$ rad m^3 s^{-1}. The population transfer rate $D^0(n\ 2\ 3/2 \to n\ 2\ 5/2)/n_{\rm H} \leq 4 \times 10^{-14}$ rad m^3 s^{-1} and the linear polarization transfer rate $D^2(n\ 2\ 3/2 \to n\ 2\ 5/2)/n_{\rm H} \leq 8\times10^{-15}$ rad m^3 s^{-1}. These numerical values are given for $n^* \leq 4$ which include most of the lines of interest for the second solar spectrum studies. The linear polarization transfer rates are smaller than the other rates. In fact Eq. (3) shows that $D^2(n\ 2\ 3/2 \to n\ 2\ 5/2)$ is a linear combination of $\zeta(nlJM_J \to nlJ'M'_J, T)$. The coefficients of this linear combination have the sign of $(3M_J^2 - J(J+1))\times(3M_J'^2 - J'(J'+1))$. Therefore these coefficients are sometimes positive and sometimes negative. Consequently, due to the compensation between the different collisional rates $\zeta(nlJM_J \to nlJ'M'_J, T)$, $D^2(n\ 2\ 3/2 \to n\ 2\ 5/2)$ is small compared with the other rates. For similar reasons circular polarization transfer rates ($k = 1$) are negative for ($J = 1/2 \to J' = 3/2$) and ($J = 3/2 \to J' = 5/2$). This remark is in agreement with the negative quantum chemistry orientation transfer rate obtained by Kerkeni (2002) for Na D lines ($J = 1/2 \to J' = 3/2$). We do not give our results concerning the circular polarization transfer because they are not needed for interpretation of the second solar spectrum.

5. Discussion

The interactions of importance for the depolarization rates, and the polarization and population transfer rates calculations are

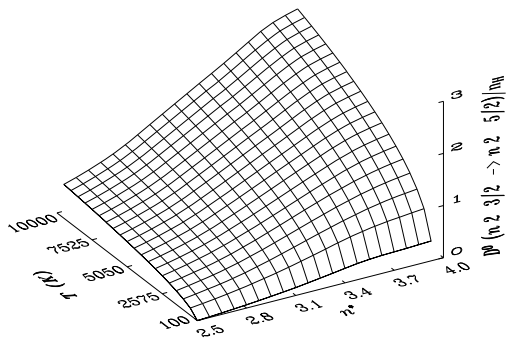

Fig. 2. Population transfer rate ($k = 0$), per unit H-atom density, as a function of temperature T and n^*. $l = 2$, $S = \frac{1}{2}$, $J = \frac{3}{2}$ and $J' = \frac{5}{2}$. Population transfer rate is given in 10^{-14} rad m^3 s^{-1}.

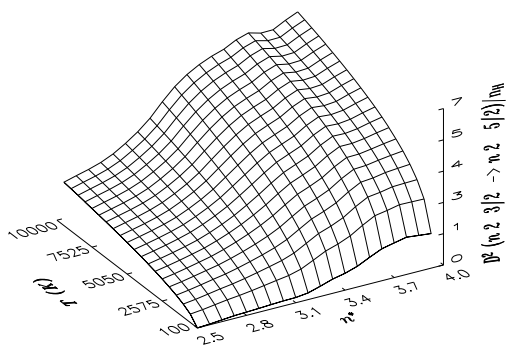

Fig. 3. Linear polarization transfer rate ($k = 2$), per unit H-atom density, as a function of temperature T and n^*. $l = 2$, $S = \frac{1}{2}$, $J = \frac{3}{2}$ and $J' = \frac{5}{2}$. Linear polarization transfer rate is given in 10^{-15} rad m^3 s^{-1}.

the intermediate-range interactions. In the corresponding regions accurate interaction potentials are required. Examination of the RSU potential, used in this work, shows that long-range regions have the usual R^{-6} behaviour but intermediate-regions have $\sim R^{-10}$ behaviour. The van der Waals potential is proportional to R^{-6} at all separations and so that gives a good description of the problem only at long-range separations. The van der Waals potential underestimates the magnitude of the intermediate-range interactions. For this reason it can be seen why the calculations using the van der Waals potential underestimate the depolarization and collisional transfer rates values. The results of Paper I showed that the RSU potential gave depolarization rates which were in agreement (<20% for solar temperatures) with the quantum chemistry calculations.

Unfortunately, there is neither experimental nor quantum chemistry depolarization and collisional transfer rates for d states (at least to the authors' knowledge) to compare with. The main differences between the RSU potentials and those from quantum chemistry, which are more accurate, occur at short-range interactions. We verified that, as for the p states calculations in Paper I, these close collisions do not influence the computed depolarization and collisional transfer rates for the d states. We expect that a rather good agreement with a full quantum mechanical treatment (difference less than 20%) would also occur for our present d states results.

6. Conclusion

The problem is to determine a great number of depolarization and collisional transfer rates by isotropic collisions with H-atoms. Our method was presented, tested and used with success for p states in Paper I. In the present paper we have given depolarization and collisional transfer rates corresponding to d states. These results are needed to model the formation of observed lines, and thus interpret the observations in terms of the solar magnetic field. The need is particularly strong for data for heavy complex atoms which are inaccessible to the quantum chemistry approach. An extension to f atomic states ($l = 3$) is a further interesting step in view of an extrapolation for $l > 3$ states. Such an extension to higher l-values would be useful for a global interpretation of the "second solar spectrum". This work is in progress. Adaptation and application of our theory to the determination of the depolarization and collisional transfer rates of singly ionized atoms lines by collisions with H-atoms will also be the subject of further papers.

References

Anstee, S. D., & O'Mara, B. J. 1991, MNRAS, 253, 549
Anstee, S. D. 1992, Ph.D. Thesis, Univ. Queensland
Anstee, S. D., & O'Mara, B. J. 1995, MNRAS, 276, 859
Anstee, S. D., O'Mara, B. J., & Ross, J. E. 1997, MNRAS, 284, 202
Barklem, P. S., & O'Mara, B. J. 1997, MNRAS, 290, 102
Barklem, P. S., & O'Mara, B. J. 1998, MNRAS, 296, 1057
Barklem, P. S. 1998, Ph.D. Thesis, Univ. Queensland
Barklem, P. S., Piskunov, N., & O'Mara, B. J. 2000, A&A, 142, 467
Bommier, V., & Molodij, G. 2002, A&A, 381, 241
Derouich, M., Sahal-Bréchot, S., Barklem, P. S., & O'Mara, B. J. 2003, A&A, 404, 763
Kerkeni, B. 2002, A&A, 390, 791
Manso Sainz, R., & Landi Degl'Innocenti, E. 2002, A&A, 394, 1093
Messiah, A. 1961, Mécanique Quantique (Paris: Dunod)
Roueff, E. 1974, J. Phys. B, 7, 185
Sahal-Bréchot, S. 1977, ApJ, 213, 887
Stenflo, J. O., & Keller, C. U. 1997, A&A, 321, 927

A&A 414, 373–376 (2004)
DOI: 10.1051/0004-6361:20034144
© ESO 2004

Astronomy & Astrophysics

On the collisional depolarization and transfer rates of spectral lines by atomic hydrogen

III. Application to f-states of neutral atoms

M. Derouich[1], S. Sahal-Bréchot[1], and P. S. Barklem[2]

[1] Observatoire de Paris-Meudon, LERMA UMR CNRS 8112, 5 place Jules Janssen, 92195 Meudon Cedex, France
[2] Department of Astronomy and Space Physics, Uppsala University, Box 515, S 751 20 Uppsala, Sweden

Received 1 August 2003 / Accepted 30 September 2003

Abstract. The theory of collisional depolarization of spectral lines by atomic hydrogen (Derouich et al. 2003a; Derouich et al. 2003b) is extended to f-atomic levels ($l = 3$). Depolarization rates, polarization and population transfer rates are calculated and results are given. Each cross section as a function of the effective quantum number for a relative velocity of 10 km s^{-1} is given together with an exponent λ, if it exists, with the assumption that the cross section varies with velocity as $v^{-\lambda}$. The general trends of depolarization rates, polarization transfer rates and population transfer rates are discussed.

Key words. Sun: atmosphere – atomic processes – line: formation – polarization

1. Introduction

The observation of the so-called "second solar spectrum" (a term first suggested by V. V. Ivanov; see Stenflo & Keller 1997; Stenflo et al. 2000; Stenflo 2001; Gandorfer 2000; Gandorfer 2002), which is the spectrum of the linear polarization observed near the limb, is due to the scattering of the underlying anisotropic radiation. The atomic polarization may be modified by several factors, in particular the magnetic field (Hanle effect), and also the isotropic collisions with the neighboring particles of hydrogen. Therefore the depolarization rates, polarization and population transfer rates by collisions with hydrogen are needed in order to quantitatively interpret the observed polarization in terms of magnetic fields in solar quiet regions.

In Derouich et al. (2003a) and Derouich et al. (2003b) (hereafter Papers I and II, respectively), a semi-classical theory for the calculation of depolarization rates, polarization and population transfer rates has been developed and applied to p ($l = 1$) and d ($l = 2$) atomic states. In the present paper we extend this theory to f-atomic levels ($l = 3$). This paper presents the first calculations of the depolarization and the collisional transfer rates for f-atomic states.

Our semi-classical theory is not specific for a given atom and its application is possible even to heavy atoms (Ti, Fe, ...), for which there are no data available for depolarization rates, transfer of polarization and population rates. The extension of this method permits calculation of depolarization and collisional transfer rates of p ($l = 1$), d ($l = 2$) and f ($l = 3$) atomic levels. It should now be possible to rapidly obtain the large amount of data needed for the interpretation of the second solar spectrum. Using our method, the general trends of all rates for p ($l = 1$), d ($l = 2$) and f ($l = 3$) atomic levels with orbital angular momentum quantum number l can be discussed for the first time.

2. Method

The method used to determine depolarization rates, transfer of polarization and population rates is the same as the one previously introduced in Papers I and II. We denote as $D^k(nlJ, T)$ the collisional depolarization rate for the statistical tensor of rank k. Each level of total angular momentum J relaxes with $2J+1$ independent depolarization rates. In particular $D^0(nlJ, T)$ is the destruction rate of population, which is zero since elastic collisions do not alter the population of an atomic level (nlJ). $D^1(nlJ, T)$ is the destruction rate of orientation (circular polarization) and $D^2(nlJ, T)$ is the destruction rate of alignment (linear polarization) which is of interest in the understanding of the second solar spectrum. If quenching must be taken into account, $D^k(nlJ \to nlJ', T)$ corresponds to collisional transfer of population ($k = 0$), orientation ($k = 1$) and alignment ($k = 2$) (Paper II). Since potentials are computed in the rotating frame, which is obtained from the fixed laboratory frame by means of the geometrical rotation $R\,(\beta, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$, the interaction potential

Send offprint requests to: M. Derouich,
e-mail: Moncef.Derouich@obspm.fr

matrix is diagonal (see, for example, Paper I). The extension of our calculations to f-atomic levels ($l = 3$) requires the determination of seven RSU potentials $V_{\mathrm{eff,m}}$ ($-3 \leq m \leq 3$). For more details we refer the reader to Paper I and Paper II and to the ABO papers (Anstee 1992; Anstee & O'Mara 1991, 1995; Anstee et al. 1997; Barklem 1998; Barklem & O'Mara 1997; Barklem et al. 1998). The total wave function $|\psi\rangle$ of the system is developed over the basis formed by the eigenvectors $|M_l\rangle$:

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \sum_{M_l} a_{M_l}(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E^0_{M_l}t}\left|M_l\right\rangle \tag{1}$$

where the $E^0_{M_l}$ are the energy eigenvalues of the isolated atoms. For f-states, seven semi-classical coupled linear differential equations describing the evolution of the manifold of states are obtained by using the time-dependent Schrödinger equation (see Barklem et al. 1998). After integration of these coupled equations over an entire collision, we obtain the $a_{M_l}(t)$ coefficients and then the transition T-matrix elements (Paper I, Paper II). All rates are obtained after integration over impact parameters and velocities, of transition probabilities given by Eq. (39) in Paper I and Eq. (11) in Paper II.

3. Results

As for the p and d atomic state calculations, in most cases the behaviour of the cross sections with the relative velocity v obeys a power law of the form:

$$\sigma^k(n3J \to n3J', v)(J = J' \text{ and } J \neq J') = \sigma^k(n3J \to n3J', v_0)\left(\frac{v}{v_0}\right)^{-\lambda^k(n3J\to n3J')}, \tag{2}$$

where v_0 (=10 km s^{-1}) is a typical velocity where the cross section is calculated. Tables 1 and 2 give respectively variation of cross sections with the effective principal quantum number n^* and the corresponding velocity exponents. n^* is related to E_{nl} by $n^* = [2(E_\infty - E_{nl})]^{-1/2}$, E_∞ and E_{nl} being the binding energy of the ground state and the energy of the state of the valence electron respectively. Cross sections for other velocities can be obtained from Tables 1 and 2 using Eq. (2). Tables 1 and 2 can be interpolated for an appropriate n^* corresponding to a given observed line in order to obtain the needed rates (Paper I, Paper II). For cross sections obeying Eq. (2), the collisional depolarization and transfer rates can be expressed by Eq. (13) of Paper II. Sometimes, especially for the alignment transfer calculations, such behaviour was not obeyed (the cross sections showed oscillations with relative velocities) and so $\lambda^k(n3J \to n3J')$ is not reported (Table 2). We have to calculate directly the cross sections for each velocity. The collisional depolarization and transfer rates $D^k(nlJ \to nlJ', T)$ ($J = J'$ and $J \neq J'$) follow from numerical integration over the velocities.

Figure 1 shows the alignment depolarization rates ($k = 2$) as a function of the local temperature T and n^* for $l = 3$. The population transfer rates ($k = 0$) and the linear polarization transfer rates ($k = 2$) as a function of T and n^* are displayed in Figs. 2 and 3. All these rates increase with temperature. For a temperature $T \leq 10\,000$ K, the destruction rate of alignment

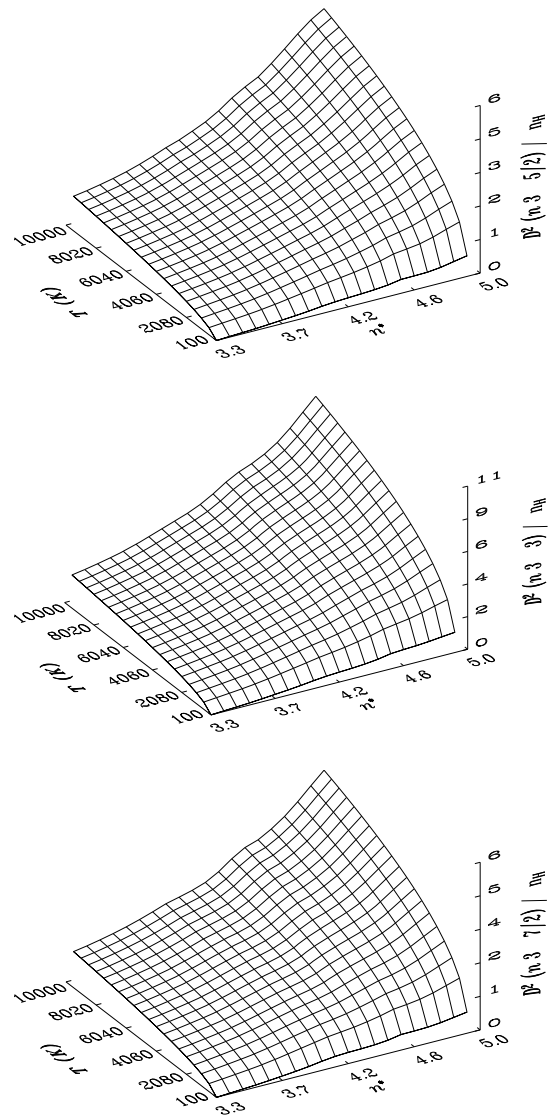

Fig. 1. Depolarization rates per unit H-atom density as a function of temperature T and n^*. For $l = 3$, each figure: $S = \frac{1}{2}$ and $J = \frac{5}{2}$; $S = 0$ and $J = 3$; $S = \frac{1}{2}$ and $J = \frac{7}{2}$. Depolarization rates are given in 10^{-14} rad m^3 s^{-1}.

$D^2(n\ 3\ 5/2)/n_{\mathrm{H}} \leq 7 \times 10^{-14}$ rad m^3 s^{-1}, $D^2(n\ 3\ 3)/n_{\mathrm{H}} \leq 12 \times 10^{-14}$ rad m^3 s^{-1} and $D^2(n\ 3\ 7/2)/n_{\mathrm{H}} \leq 7 \times 10^{-14}$ rad m^3 s^{-1}. The population transfer rate $D^0(n\ 3\ 5/2 \to n\ 3\ 7/2)/n_{\mathrm{H}} \leq 7 \times 10^{-14}$ rad m^3 s^{-1} and the linear polarization transfer rate $D^2(n\ 3\ 5/2 \to n\ 3\ 7/2)/n_{\mathrm{H}} \leq 5 \times 10^{-15}$ rad m^3 s^{-1}. These numerical values are given for $n^* \leq 5$ which includes most of the lines of interest.

4. General trends

For a given effective quantum number n^*, and for the cases $l = 1$, $l = 2$, and $l = 3$, destruction rates of alignment are such that $D^2(n\ 3\ 3, T) < D^2(n\ 2\ 2, T) < D^2(n\ 1\ 1, T)$. A similar result has been obtained for the broadening of spectral lines. In fact, Barklem et al. (1998) have previously shown that, also for

Table 1. Variation of the cross sections, for the relative velocity of 10 km s^{-1}, with the effective principal number. Cross sections are in atomic units.

n^*	$\sigma^2(n3\frac{5}{2})$	$\sigma^2(n33)$	$\sigma^2(n3\frac{7}{2})$	$\sigma^0(n3\frac{5}{2} \to n3\frac{7}{2})$	$\sigma^2(n3\frac{5}{2} \to n3\frac{7}{2})$
3.3	426	782	491	478	40
3.4	451	831	521	518	44
3.5	489	892	561	565	51
3.6	535	962	603	616	58
3.7	584	1055	654	684	67
3.8	637	1151	708	768	81
3.9	695	1249	765	865	96
4	759	1365	824	962	101
4.1	835	1467	875	1031	110
4.2	890	1572	899	1119	108
4.3	1024	1777	1051	1188	114
4.4	1077	1908	1097	1297	121
4.5	1236	2166	1247	1418	121
4.6	1249	2279	1306	1508	116
4.7	1420	2411	1432	1503	125
4.8	1485	2515	1485	1529	118
4.9	1521	2587	1504	1630	132
5	1928	3135	1845	1786	130

Table 2. Velocity exponents $\lambda^k(nlJ \to nlJ')$ ($J = J'$ and $J \neq J'$) corresponding to the cross sections of Table 1.

n^*	$\lambda^2(n3\frac{5}{2})$	$\lambda^2(n33)$	$\lambda^2(n3\frac{7}{2})$	$\lambda^0(n3\frac{5}{2} \to n3\frac{7}{2})$	$\lambda^2(n3\frac{5}{2} \to n3\frac{7}{2})$
3.3	0.228	0.277	0.301	0.280	–
3.4	0.249	0.295	0.315	0.283	–
3.5	0.252	0.303	0.325	0.288	–
3.6	0.260	0.311	0.331	0.289	–
3.7	0.275	0.329	0.346	0.289	–
3.8	0.275	0.334	0.354	0.296	–
3.9	0.282	0.342	0.367	0.301	0.103
4	0.306	0.363	0.402	0.320	0.117
4.1	0.298	0.362	0.412	0.344	0.176
4.2	0.278	0.336	0.384	0.351	0.267
4.3	0.240	0.306	0.333	0.370	0.328
4.4	0.235	0.304	0.319	0.394	0.384
4.5	0.262	0.333	0.349	0.415	0.396
4.6	0.215	0.317	0.311	0.440	0.411
4.7	0.181	0.289	0.284	0.435	0.497
4.8	0.192	0.268	0.269	0.409	0.600
4.9	0.218	0.248	0.268	0.363	0.587
5	0.222	0.224	0.242	0.331	0.500

a given n^*, lines with upper p-states ($l = 1$) are more broadened than lines with upper d-states ($l = 2$), and similarly lines with upper d-states are more broadened than lines with upper f-states ($l = 3$). This effect is similar to that first seen observationally in the solar spectrum by Carter (1949). In general, when the orbital angular momentum quantum number l increases, the depolarization rates and transfer of polarization and population rates decrease for a given value of the energy of the state of the valence electron E_{nl}.

For f-states, when $J = 7/2$ and $J' = 5/2$ we have: $D^0(n\ 3\ 7/2 \to n\ 3\ 5/2, T) > D^1(n\ 3\ 7/2 \to n\ 3\ 5/2, T) > D^2(n\ 3\ 7/2 \to n\ 3\ 5/2, T) > D^4(n\ 3\ 7/2 \to n\ 3\ 5/2, T) > D^3(n\ 3\ 7/2 \to n\ 3\ 5/2, T) > D^5(n\ 3\ 7/2 \to n\ 3\ 5/2, T)$. We recall that $D^k(n\ l\ J \to n\ l\ J', T)$ is a linear combination

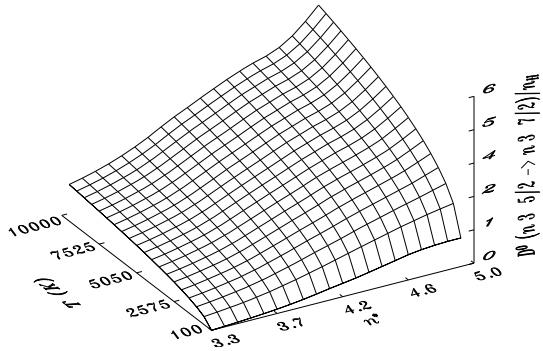

Fig. 2. Population transfer rate per unit H-atom density ($k = 0$) as a function of temperature T and n^*. $l = 3$, $S = \frac{1}{2}$, $J = \frac{5}{2}$ and $J' = \frac{7}{2}$. Population transfer rate is given in 10^{-14} rad m^3 s^{-1}.

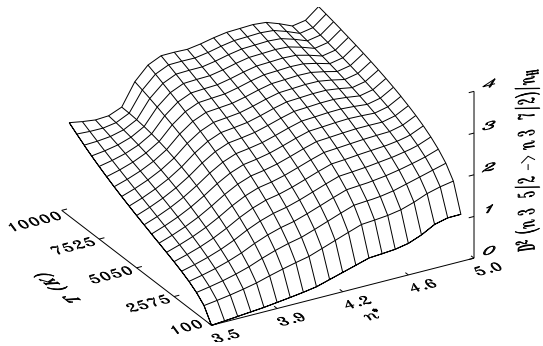

Fig. 3. Linear polarization transfer rate per unit H-atom density ($k = 2$) as a function of temperature T and n^*. $l = 3$, $S = \frac{1}{2}$, $J = \frac{5}{2}$ and $J' = \frac{7}{2}$. Linear polarization transfer rate is given in 10^{-15} rad m^3 s^{-1}.

of $\zeta(nlJM_J \rightarrow nlJ'M'_J, T)$ (Eq. (3) in Paper II). The population transfer rate is the greater transfer rate because for $k = 0$ the coefficients of this linear combination are positive. These coefficients are constant and equal to $1/\sqrt{(2J+1)(2J'+1)}$ which leads to a $D^0(nlJ \rightarrow nlJ', T)$ which is proportional to $\zeta(nlJ \rightarrow nlJ', T)$ (Eq. (5) in Paper II). However, the sign of the coefficients of the linear combination for transfer rates of rank $k \geq 1$ is sometimes positive and sometimes negative. For example, these coefficients have the sign of $M_J \times M'_J$ for orientation transfer rates ($k = 1$) and the sign of $(3M_J^2 - J(J+1)) \times (3M_J'^2 - J'(J'+1))$ for alignment transfer rates. The other coefficients of the linear combination for $k > 2$ may be obtained on request from the authors. We conclude that, for $k \neq 0$, the collisional transfer rates may be positive or negative as a function of transition probabilities between the Zeeman sublevels which depend on n^*. The depolarization rates are usually positive.

All rates were found to increase with temperature T. The functional form $D(T) = AT^{(1-\lambda)/2}$ may be accurately fitted to the depolarization rates and the population transfer rates (Paper I, Paper II). However, sometimes the collisional transfer rates with $k \neq 0$, cannot be fitted by the power-law $AT^{(1-\lambda)/2}$ and so λ is not reported (Table 2 in the present paper and Table 2 in Paper II). This is due to the fact that these collisional transfer rates are the sum of incoherent contributions from the states $|nlJM_J\rangle$ and $|nlJ'M'_J\rangle$. We notice that the above remarks are valid also for p and d-atomic states.

5. Discussion

Unfortunately, there are neither experimental nor quantum chemistry depolarization and collisional transfer rates for f-states for comparison. We expect that the main differences between the RSU potentials and those from quantum chemistry, which are considered as more realistic, occur for the short-range interactions. We have verified that these close collisions do not influence the computed depolarization and collisional transfer rates for f-states. The decisive contribution to the depolarization and collisional transfer rates occurs at intermediate-range interactions. In Paper I, which is concerned with p-states, comparison with quantum chemistry results in Kerkeni (2002) gives depolarization rates in agreement to better than 20%. Extrapolating our results obtained for p and d states (Paper I, Paper II), we expect a rather good agreement (relative difference less than 20% at solar temperatures) between our rates obtained for f-states and a full quantum mechanical treatment.

6. Conclusion

This paper is a continuation of a series concerned with theoretical calculations of the depolarization and collisional transfer rates. Thanks to the extension to f-atomic states ($l = 3$), we can draw the first general conclusions about the trends of all rates as a function of orbital angular momentum quantum number l. An extrapolation for $l > 3$ would be useful for a more complete interpretation of the "second solar spectrum". This work is in progress. An extension of our theory to the case of ions will be the subject of further papers.

References

Anstee, S. D., & O'Mara, B. J. 1991, MNRAS, 253, 549
Anstee, S. D. 1992, Ph.D. Thesis, Univ. Queensland
Anstee, S. D., & O'Mara, B. J. 1995, MNRAS, 276, 859
Anstee, S. D., O'Mara, B. J., & Ross, J. E. 1997, MNRAS, 284, 202
Barklem, P. S., & O'Mara, B. J. 1997, MNRAS, 290, 102
Barklem, P. S., O'Mara, B. J., & Ross, J. E. 1998, MNRAS, 296, 1057
Barklem, P. S. 1998, Ph.D. Thesis, Univ. Queensland
Carter, W. W. 1949, Phys. Rev., 76, 962
Derouich, M., Sahal-Bréchot, S., Barklem, P. S., & O'Mara, B. J. 2003a, A&A, 404, 763 (Paper I)
Derouich, M., Sahal-Bréchot, S., & Barklem, P. S. 2003b, A&A, 409, 369 (Paper II)
Gandorfer, A. 2000, The Second Solar Spectrum: A high spectral resolution polarimetric survey of scattering polarization at the solar limb in graphical representation, vol. 1: 4625 Å to 6995 Å (Hochschulverlag AG an der ETH Zurich)
Gandorfer, A. 2002, The Second Solar Spectrum: A high spectral resolution polarimetric survey of scattering polarization at the solar limb in graphical representation, vol. 2: 3910 Å to 4630 Å (Hochschulverlag AG an der ETH Zurich)
Kerkeni, B. 2002, A&A, 390, 791
Stenflo, J. O., & Keller, C. U., 1997, A&A, 321, 927
Stenflo, J. O., Keller, C. U., & Gandorfer, A., 2000, A&A, 355, 789
Stenflo, J. O. 2001, in Advanced Solar Polarimetry: Theory, Observation, and Instrumentation, ed. M. Sigwarth (San Francisco: Astronomical Society of the Pacific), ASP Conf. Ser., 236, 97

Astronomy & Astrophysics manuscript no. February 23, 2004
(DOI: will be inserted by hand later)

Collisional depolarization and transfer rates of spectral lines by atomic hydrogen. IV: application to ionised atoms.

M. Derouich[1], S. Sahal-Bréchot[1], and P. S. Barklem[2]

[1] Observatoire de Paris-Meudon, LERMA UMR CNRS 8112, 5, Place Jules Janssen, F-92195 Meudon Cedex, France.
[2] Department of Astronomy and Space Physics, Uppsala University, Box 515, S 751 20 Uppsala, Sweden
e-mail: Moncef.Derouich@obspm.fr

Received 2004 / accepted XXXX

Abstract. The semi-classical theory of collisional depolarization of spectral lines of neutral atoms by atomic hydrogen (Derouich et al. 2003a; Derouich et al. 2003b; Derouich et al. 2004 and references therein) is extended to spectral lines of singly ionised atoms. In this paper we apply our general method to the particular cases of the $3d\ ^2D$ and $4p\ ^2P$ states of the CaII ion and to the $5p\ ^2P$ state of the SrII ion. Analytical expressions of all rates as a function of local temperature are given. Our results for the CaII ion are compared to recent quantum chemistry calculations. A discussion of our results is presented.

Key words. Sun: atmosphere - atomic processes - line: formation, polarization

1. Introduction

Observations of the linearly polarized radiation at the limb of the Sun (known as the "second solar spectrum"), which is formed by coherent scattering processes, show rich structures (Stenflo & Keller 1997; Stenflo et al. 2000; Stenflo 2001; Trujillo Bueno et al. 2001; Bommier & Molodij 2002). The linear polarization observations reported in the atlas recently published by Gandorfer (2000, 2002) show significant polarization peaks in many spectral lines of ions, e.g. NdII 5249 Å, EuII 4129 Å, CeII 4062 Å, CeII 4083 Å, Ba II D2 4554 Å, ZrII 5350 Å, etc.. Several surveys of the scattering polarization throughout the solar spectrum (Stenflo et al. 1980, 1983a, 1983b; see also the Q/I observations of Stenflo et al. 2000 and the full Stokes-vector observations of Dittmann et al. 2001) have shown that ionised lines such as SrII 4078 Å and the IR triplet of CaII are two of the more strongly polarized. The interpretation of these observations leads to the indirect determination of the turbulent magnetic field strength via the Hanlé effect and the knowledge of the physical conditions of the medium. Such interpretation requires the solution of the coupling between the polarized radiative transfer equations (RTE) and the statistical equilibrium equations (SEE) taking into account the contributions of isotropic depolarizing collisions with neutral hydrogen. Depolarization and polarization transfer rates are currently available for ionised calcium levels, which have been obtained through sophisticated quantum chemistry methods which are accurate but cumbersome. Indeed, it is very difficult and sometimes not accurate to treat collision processes, involving heavy ionised atoms like Ti II, Ce II, Fe II, Cr II, Ba II..., by standard quantum chemistry methods. It would be useful to develop alternative methods capable of giving results for many levels of ionised atoms rapidly and with reasonable accuracy.

The aim of this paper is to extend the semi-classical theory of collisional depolarization of spectral lines of neutral atoms by atomic hydrogen given in previous papers of this series (Derouich et al. 2003a; Derouich et al. 2003b; Derouich et al. 2004; hereafter Papers I, II and III respectively) to spectral lines of ions. This paper outlines the necessary adjustments to the theory presented in Papers I, II and III for extension to spectral lines of ions. Our results are presented and compared with those obtained in the case of CaII levels by the quantum chemistry method (Kerkeni et al. 2003). We also compare the results to the depolarization rates computed with the Van der Waals potential. An advantange of the present method is that it is not specific for a given perturbed ion, and may be easily applied to any singly ionised species. Indeed, we have applied our method to calculate depolarization and polarization transfer rates for the upper state $5p\ ^2P$ of the SrII 4078 Å line.

The main feature of the technique is the use of perturbation theory in calculating the interatomic potentials. A key parameter in this theory is E_p which approximates the energy denominator in the second-order interaction

terms by an average value (Paper I and ABO papers: Anstee 1992; Anstee & O'Mara 1991, 1995; Barklem 1998; Barklem & O'Mara 1997; Barklem, O'Mara & Ross 1998). A discussion of the effect of E_p variation on depolarization rates is presented. Finally, we show that the present semi-classical method gives results in agreement with accurate but time consuming quantum chemistry calculations to better than 15 % for the CaII ion (T= 5000K). Using our method it should now be possible to rapidly obtain the data needed to interpret quantitatively the Stokes parameters of the observed lines.

2. Statement of the problem

Under typical conditions of formation of observed lines in the solar atmosphere, the atomic system (atom, ion or molecule) suffers isotropic collisions with hydrogen atoms of the medium before it radiates. The states of the bath of hydrogen atoms are unperturbed. In the tensorial formulation (Fano & Racah 1959; Messiah 1961; Fano 1963), the internal states of the perturbed particles (here these particles are singly ionised atoms) are described by the spherical tensor components ${}^{nlJ}\rho^k_q$ of the density matrix. Owing to the isotropy of the depolarizing collisions, the depolarization rates, polarization and population transfer rates are q-independent. The term corresponding to the depolarizing collisions in the master equation is given by

$$\begin{aligned}\left(\frac{d\,{}^{nlJ}\rho^k_0}{dt}\right)_{coll} &= -D^k(nlJ,\ T)\ {}^{nlJ}\rho^k_0 \\ &+ \sum_{J\neq J'} D^k(nlJ \to nlJ',\ T)\ {}^{nlJ'}\rho^k_0 \qquad (1)\\ &+ \text{quenching term.}\end{aligned}$$

$D^k(nlJ,\ T)$ is the collisional depolarization rate of the ionic level (nlJ) at the local temperature T ($0 \leq k \leq 2J$). $D^0(nlJ,\ T)$ is the destruction rate of population which is zero since elastic collisions ($J = J'$) do not alter the population of the level (nlJ). $D^1(nlJ,\ T)$ is the destruction rate of orientation (related to circular polarization) and $D^2(nlJ,\ T)$ is the destruction rate of alignment of the level (nlJ) which is of interest in our astrophysics framework because it is related to the observed linear polarization.

$D^k(nlJ \to nlJ',\ T)$ is the polarization transfer rate between the levels $|nlJ\rangle \to |nlJ'\rangle$, where $0 \leq k \leq k_{\max}$, $k_{\max} = 2J$ if $J < J'$ (or if $J > J'$ then $k_{\max} = 2J'$). In particular, $D^k(nlJ \to nlJ',\ T)$ corresponds to collisional transfer of population ($k = 0$), orientation ($k = 1$) and alignment ($k = 2$).

Higher order terms of $D^k(nlJ,\ T)$ and $D^k(nlJ \to nlJ',\ T)$ with $k > 2$ can play a role in the SEE and have to be calculated. Note that, for the analysis of the linear polarization spectrum, only depolarization and polarization transfer rates with even k are need. Odd k-terms can be eliminated from the SEE.

$D^k(nlJ,\ T)$ and $D^k(nlJ \to nlJ',\ T)$ can be written as a linear combination of the collisional transition rates between the fine stucture sublevels $\zeta(nlJM_J \to nlJ'M'_J,\ T)$ (Papers I, II and III, Sahal-Bréchot 1977); for depolarization rates $D^k(nlJ,\ T)$ and transfer rate of population $D^0(nlJ \to nlJ',\ T)$, the coefficients of this linear combination are positive while the signs of the coefficients of the linear combination for transfer rates of rank $k \geq 1$ may be either positive or negative. This explains why transfer rates of rank $k \geq 1$ are significantly smaller (Paper III). In our semi-classical theory, the collisional transition rate between the sublevels $|nlJM_J\rangle \to |nlJM'_J\rangle$ is given by (Paper I; Paper II):

$$\begin{aligned}\zeta(nlJM_J \to nlJM'_J,\ T) = n_H \int_0^\infty \int_0^\infty 2\pi b\, db\, v\ f(v)\ dv \\ \times |\langle nlJM_J|I - S(b,v)|nlJM'_J\rangle|^2 \qquad (2)\end{aligned}$$

where $f(v)$ is the Maxwell distribution of velocities for the local temperature T and n_H is the local hydrogen atom number density. I is the unit matrix and $T = I - S$ is the so-called transition matrix depending on the impact-parameter b and relative velocity v. The collisional depolarization rates and the collisional transfer rates, which are linear combinations of the $\zeta(nlJM_J \to nlJM'_J,\ T)$ given by equation (2), can be expressed in terms of the T-matrix elements. The transition matrix T is functionally dependent on the interaction energy matrix of hydrogen in its ground state with the perturbed ion. Indeed, the transition matrix elements in the dyadic basis are obtained by solving the time-dependent Schrödinger equation (Paper I)

$$(H_A + H_P + V_{\text{eff}}(R))|\psi(t)\rangle = \mathrm{i}\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}. \qquad (3)$$

V_{eff} is the ion-hydrogen interaction used in this work and $|\psi(t)\rangle$ is the wave function of the system (ion+hydrogen). $H_A + H_P$ is the Hamiltonian of the system at the interatomic distance $R = \infty$ (Fig. 1).

3. Ion-hydrogen interaction potentials

The interaction potential for a singly ionised atom interacting with a hydrogen is treated in much the same way as for the neutral atom interaction with hydrogen (Papers I, II and III; ABO papers). In the coordinate system of Fig. 1, V is given, in atomic units, by (Barklem & O'Mara 1998):

$$V = \frac{2}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_2} - \frac{2}{p_1} = \frac{1}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_2} - \frac{1}{p_1} + V_{\text{ind}} \qquad (4)$$

and atomic units are used hereafter. $V_{\text{ind}} = 1/R - 1/p_1$ is the part representing an inductive interaction between the excess charge on the ionised atom and hydrogen atom. Quenching is neglected and thus we consider only the subspace nl ($2l$+1 states) and we denote the product state of the two separated atoms at $R = \infty$ by $|M_l\rangle$. By application of time-independent perturbation theory to second-order, the interaction potential matrix elements are given by:

$$\langle M_l|V_{\rm eff}|M_l\rangle = \langle M_l|V|M_l\rangle + \sum_{M_l'\neq M_l} \frac{\langle M_l|V_{\rm ind}|M_l'\rangle\langle M_l'|V_{\rm ind}|M_l\rangle}{E_{M_l}-E_{M_l'}} + \sum_{M_l'\neq M_l} \frac{\langle M_l|V-V_{\rm ind}|M_l'\rangle\langle M_l'|V-V_{\rm ind}|M_l\rangle}{E_{M_l}-E_{M_l'}}, \quad (5)$$

E_{M_l} are the unperturbed energy eigenvalues of the isolated atoms. The expression for the second-order interaction can be greatly simplified if we replace the energy denominator $E_{M_l}-E_{M_l'}$, of each sum, by a fixed average energy E_p and assume that for important separations $E_p(R)=E_p(\infty)$. This is the Unsöld approximation (Unsöld 1927; Unsöld 1955). $E_p=-4/9$ atomic units is the appropriate Unsöld energy value of the part of interaction, $V_{\rm ind}$, between excess charge on the ionized atom and hydrogen because this part is exactly the same as the H-H$^+$ interaction. Indeed, Unsöld (1927) and Dalgarno & Lewis (Dalgarno & Lewis 1956, equation 16) showed that $E_p=-4/9$ for the long-range H-H$^+$ interaction. For the part of the interaction describing the interaction between the ion without the excess charge and hydrogen atom, the Unsöld value of $-4/9$ cannot be expected to be a good approximation (Barklem & O'Mara 1998). The reason that a value of $-4/9$ works well for neutrals is the fact that the separations of energy levels of the perturbed neutral atom are small compared to the separations between the ground level and the excited levels of the hydrogen atom, and thus the denominators are dominated by contributions from the H energy levels. For ions this is not the case. As a result of the increased core charge, the energy level spacings are generally much larger than for neutrals. It necessary therefore to determine E_p directly for each state of the ion. The appropriate value of E_p can be found via:

$$E_p = -\frac{2\langle p_2^2\rangle}{C_6}, \quad (6)$$

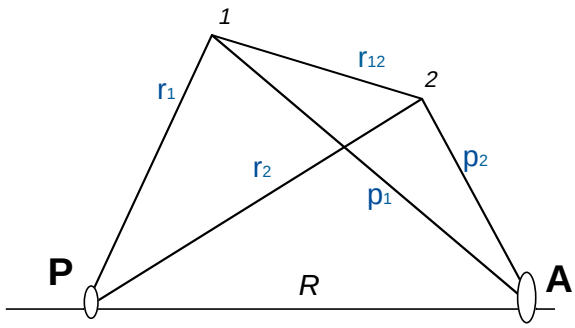

Fig. 1. The perturbed ion core (with charge Z=2) is located at A and the hydrogen perturbing core (a proton) at P. Their valence electrons are denoted by 1 and 2 respectively.

where C_6 is the Van der Waals constant C_6 averaged over all m substates. The C_6 coefficient is given by the standard expression (see for example, Goodisman 1973):

$$C_6 = \frac{3}{2} \sum_{k'\neq k}\sum_{l'\neq l} \frac{f^H_{kk'} f^A_{ll'}}{(E^H_{k'}+E^A_{l'}-E^H_k-E^A_l)(E^H_{k'}-E^H_k)(E^A_{l'}-E^A_l)} \quad (7)$$

$f^A_{ll'}$ and $f^H_{kk'}$ are the dipole oscillator strengths of all transitions to the state of interest l for the perturbed ion and the ground state k for the neutral hydrogen atom. E^H and E^A are the energy eigenvalues of the hydrogen and ionised atom respectively. More details about the calculation of C_6 are given in Barklem & O'Mara (1998) and references therein. The quantity $\langle p_2^2\rangle$ is the mean square distance between the valence electron and the perturbed ion core located at A (Fig. 1),

$$\langle p_2^2\rangle = \int_0^{+\infty} P^2_{n^*l}(p_2)\, p_2^2\, dp_2, \quad (8)$$

P_{n^*l} are the the radial wavefunctions (note $P_{n^*l}(p_2) = R_{n^*l}(p_2)p_2$) of the valence electron of the perturbed atom (Anstee 1992, Seaton 1958). n^* is the effective principal quantum number corresponding to the state $|nl\rangle$ of the valence electron (Papers I, II, III).

Using the Unsöld approximation the expression for $V_{\rm eff}$ becomes

$$\langle M_l|V_{\rm eff}|M_l\rangle = \langle M_l|V|M_l\rangle - \frac{1}{E_p}(\langle M_l|V|M_l\rangle)^2 + \frac{1}{E_p}\langle M_l|V^2|M_l\rangle + \frac{1}{E_p}(\langle M_l|V_{\rm ind}|M_l\rangle)^2 - \frac{1}{E_p}\langle M_l|V^2_{\rm ind}|M_l\rangle - \frac{9}{4}[\langle M_l|V^2_{\rm ind}|M_l\rangle - (\langle M_l|V_{\rm ind}|M_l\rangle)^2] \quad (9)$$

$V_{\rm eff}$ of equation (9) is the so-called Rayleigh-Schrödinger-Unsöld (RSU) potential (ABO Papers). For computing $V_{\rm eff}$ it is essential to determine E_p in an independent calculation, as seen in Barklem & O'Mara (1998, 2000). Thus for ionized atoms it is not possible to tabulate cross-sections as for neutral atoms (Papers I, II, III). Any calculations for depolarization and transfer of polarization involving ions must proceed line by line.

4. Determination of depolarization and polarization transfer rates

Considering a collision between a perturbed ion A and hydrogen atom H (Fig. 1). Calculation of the depolarization and transfer rates follows essentially the steps listed below:

1. calculation of the required atomic wavefunctions of the system A+H
2. determination of E_p directly for each state of the ion using equation (6)

3. numerical evaluation of the RSU interaction energy of the system A+H given by equation (9)
4. use of these interaction potentials in the Schrödinger equation describing the evolution of A+H collsional system in order to obtain the probabilities of depolarization and polarization transfer for a given impact parameter and a relative velocity (more details in Paper I; see also Papers II, III)
5. calculation of depolarization and polarization transfer cross-sections for each relative velocity by integration over impact parameters
6. integration of cross-sections over the Maxwell distribution of velocities to obtain the semi-classical depolarization and polarization transfer rates for a range of local temperatures of the medium

5. Depolarization and polarization transfer rates for Ca^+-H system

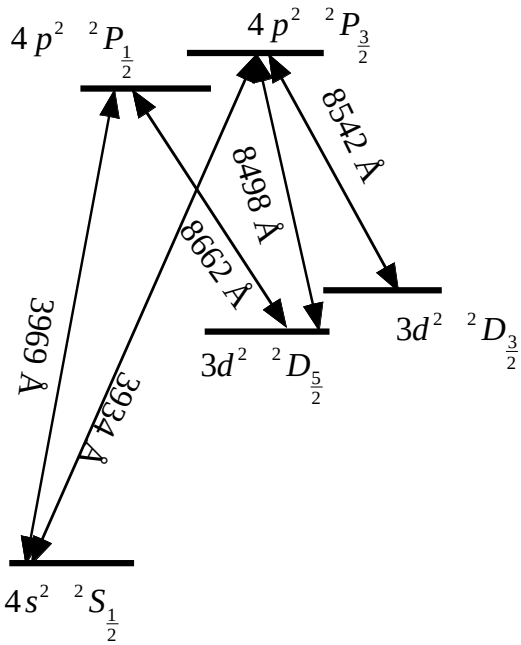

Fig. 2. Partial Grotrian diagram of CaII showing the levels and the spectral wavelengths in Å of interest in this study. Note that the level spacings in not to scale.

An important point to emphasise is that this semi-classical method for the calculation of depolarization and polarization transfer rates is not specific for a given perturbed atom or ion. This method can be applied for any perturbed ion, but we must calculate the E_p value for each case (section 3). Let us consider the case of the Ca^+-H system in view of its importance in astrophysics and because

State	$\langle p_2^2 \rangle$ (a.u.)	C_6 (a.u.)	E_p (a.u.)
$3d$	7.54	12.2	-1.236
$4p$	22.25	81.8	-0.544

Table 1. Average energy E_p for the interaction of CaII $3d$ and $4p$ states with hydrogen in its ground state together with $\langle p_2^2 \rangle$ and C_6 values.

it is possible to compare with recent calculations employing the quantum chemistry approach (Kerkeni 2003). The case of the IR triplet lines of CaII has been investigated by Manso Sainz & Trujillo Bueno 2001, 2003 and by Trujillo Bueno & Manso Sainz 2001, adopting multilevel model of ionized calcium. The term levels associated to the IR triplet lines of CaII (8498 Å, 8542 Å, and 8662 Å) are $4p\ ^2P_{1/2}$, $4p\ ^2P_{3/2}$, $3d\ ^2D_{3/2}$ and $3d\ ^2D_{5/2}$ (Figure 2). The H and K lines occur at 3969 Å and 3933 Å (Figure 2); their upper states are also the upper states of the IR triplet. Table 1 lists, for the states of interest in this work, $\langle p_2^2 \rangle$, C_6 and the corresponding E_p calculated via equation (6) (see Barklem & O'Mara 1998).

5.1. Depolarization rates

The depolarization transition probability is given by (Paper I; Sahal-Bréchot 1977):

$$\langle P^k(nlJ,b,v)\rangle_{av} = \frac{1}{2J+1}\sum_{\mu,\mu'} |\langle n\ l\ J\ \mu|T|n\ l\ J\ \mu'\rangle|^2 - \sum_{\mu,\mu',\nu,\nu'} \langle n\ l\ J\ \mu|T|n\ l\ J\ \mu'\rangle\langle n\ l\ J\ \nu|T|n\ l\ J\ \nu'\rangle^* \times \sum_{\chi}(-1)^{2J+k+\mu-\mu'} \begin{pmatrix} J & J & k \\ -\nu' & \mu' & \chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & J & k \\ \nu & -\mu & -\chi \end{pmatrix} \quad (10)$$

Owing to the selection rules for the $3j$-coefficients, the summation over χ is reduced to a single term, since $\chi = -(\mu' - \nu') = -(\mu - \nu)$. Integration over the impact-parameter b and the velocity distribution for a temperature T of the medium can be performed to obtain the depolarization rate which is given by:

$$D^k(n\ l\ J,\ T) \simeq n_H \int_0^\infty v f(v) dv \left(\pi b_0^2 + 2\pi \int_{b_0}^\infty \langle P^k(n\ l\ J, b, v)\rangle_{av}\ b\ db \right) \quad (11)$$

where b_0 is the cutoff impact-parameter and we use $b_0 = 3a_0$ as in Anstee & O'Mara (1991). The excited state $4p\ ^2P_{1/2}$ corresponds to total angular momentum $J = 1/2$, the only non-zero depolarization rate is $D^1(4\ 1\ 1/2,\ T)$. Figure 3 shows $D^1(4\ 1\ 1/2,\ T)$ as a function of the local temperature T. The non-zero depolarization rates for the $4p\ ^2P_{3/2}$ state are $D^1(4\ 1\ 3/2,\ T)$, $D^2(4\ 1\ 3/2,\ T)$ and $D^3(4\ 1\ 3/2,\ T)$, and these rates are displayed in Figure 4. The non-zero depolarization rates associated to the $3d\ ^2D_{3/2}$ and $3d\ ^2D_{5/2}$ states are $D^1(3\ 2\ 3/2,\ T)$,

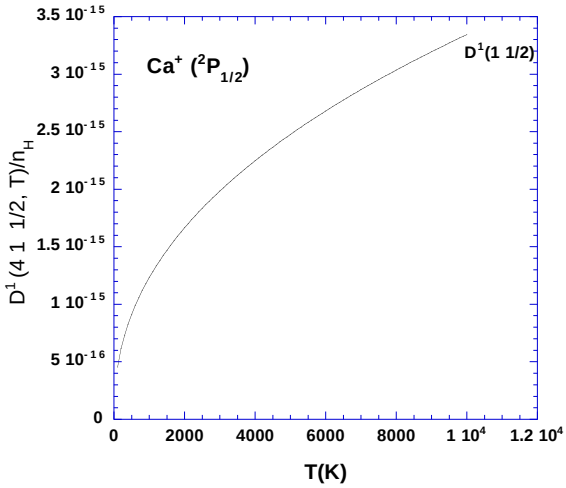

Fig. 3. Destruction rate of orientation per unit H-atom density for the CaII ion, $D^1(4\ 1\ 1/2,\ T)/n_H$, as a function of temperature T. $D^1(4\ 1\ 1/2,\ T)/n_H$ is given in rad. s^{-1}.

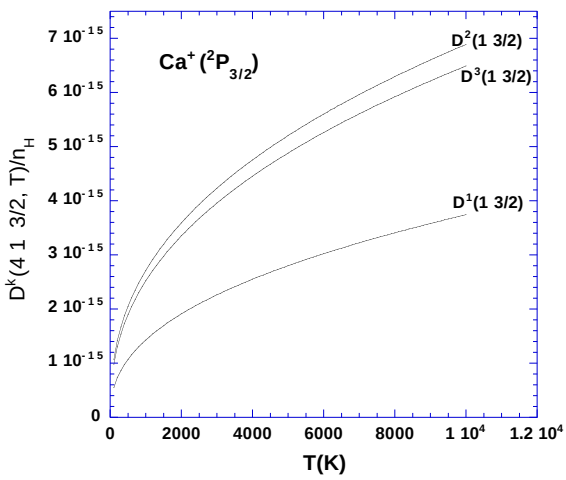

Fig. 4. Depolarization rates per unit H-atom density for the CaII ion, $D^k(4\ 1\ 3/2,\ T)/n_H$ (k=1, 2, and 3), as a function of temperature T. $D^k(4\ 1\ 3/2,\ T)/n_H$ are given in rad. m^3 s^{-1}.

$D^2(3\ \ 2\ \ 3/2,\ \ T)$, $D^3(3\ \ 2\ \ 3/2,\ \ T)$ for $3d\ ^2D_{3/2}$ and $D^1(3\ \ 2\ \ 5/2,\ \ T)$, $D^2(3\ \ 2\ \ 5/2,\ \ T)$, $D^3(3\ \ 2\ \ 5/2,\ \ T)$, $D^4(3\ \ 2\ \ 5/2,\ \ T)$ and $D^5(3\ \ 2\ \ 5/2,\ \ T)$ for $3d\ ^2D_{5/2}$ (see Figures 5 and 6).

All of the rates for the $4p\ ^2P_{1/2}$, $4p\ ^2P_{3/2}$, $3d\ ^2D_{3/2}$ and $3d\ ^2D_{5/2}$ states of CaII are found to increase with temperature in the range $100 \leq T \leq 10000$ K. As for neutral atoms, a functional form $D(T) = BT^{(1-\lambda)/2}$ can usually be accurately fit to these depolarization rates, where λ is the so-called velocity exponent (Papers I, II, III). We find the following analytical expressions for the depolarization rates in rad. s^{-1} for $100 \leq T \leq 10000$ K (except

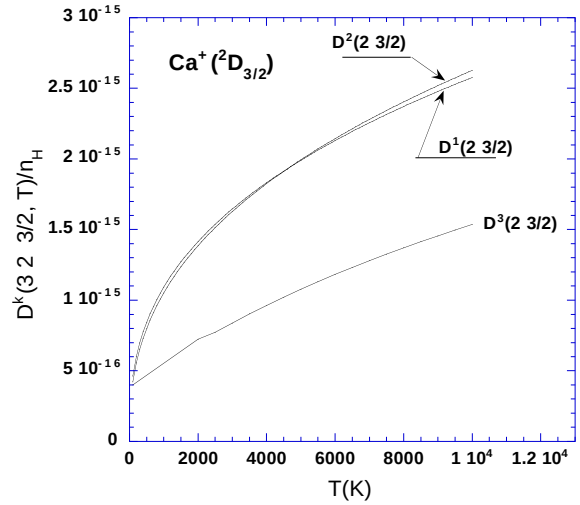

Fig. 5. Depolarization rates per unit H-atom density for the CaII ion, $D^k(3\ 2\ 3/2,\ T)/n_H$ (k=1, 2, and 3), as a function of temperature T. $D^k(3\ 2\ 3/2,\ T)/n_H$ are given in rad. m^3 s^{-1}.

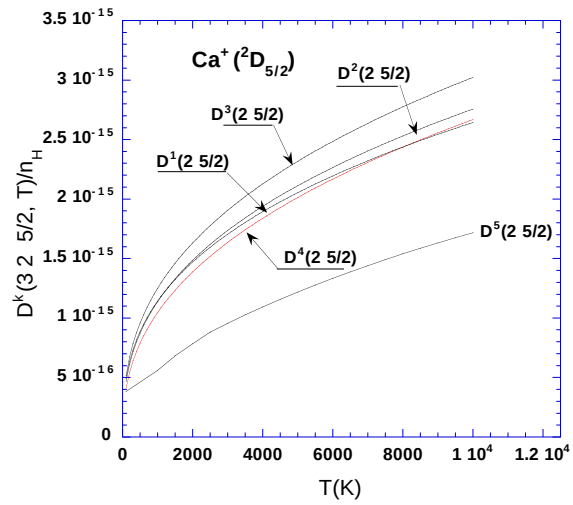

Fig. 6. Depolarization rates per unit H-atom density for the CaII ion, $D^k(3\ \ 2\ \ 5/2,\ \ T)/n_H$ (k=1, 2, 3, 4, and 5), as a function of temperature T. $D^k(3\ \ 2\ \ 5/2,\ \ T)/n_H$ are given in rad. m^3 s^{-1}.

for $D^3(3\ \ 2\ \ 5/2,\ \ T)$ and $D^5(3\ \ 2\ \ 5/2,\ \ T)$ which are given for $2500 \leq T \leq 10000$ K):

– **CaII**($4p\ ^2P_{1/2}$)-**H**($1s$):

$$D^1(4\ 1\ 1/2,\ T)\ =\ 2.4767 \times 10^{-15}\ n_H(\frac{T}{5000})^{0.433}. \quad (12)$$

– **CaII**($4p\ ^2P_{3/2}$)-**H**($1s$):

$$D^1(4\ 1\ 3/2,\ T)\ =\ 2.7993 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.418}$$

$$D^2(4\ 1\ 3/2,\ T)\ =\ 5.2034 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.405} \quad (13)$$

$$D^3(4\ 1\ 3/2,\ T)\ =\ 4.8807 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.411}$$

– **CaII**($3d\ ^2D_{3/2}$)**-H**($1s$):

$$D^1(3\ 2\ 3/2,\ T) = 1.9904 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.373}$$
$$D^2(3\ 2\ 3/2,\ T) = 1.9943 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.398} \quad (14)$$
$$D^3(3\ 2\ 3/2,\ T) = 1.0772 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.501},$$

– **CaII**($3d\ ^2D_{5/2}$)**-H**($1s$):

$$D^1(3\ 2\ 5/2,\ T) = 2.0535 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.365}$$
$$D^2(3\ 2\ 5/2,\ T) = 2.1120 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.384}$$
$$D^3(3\ 2\ 5/2,\ T) = 2.3170 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.384} \quad (15)$$
$$D^4(3\ 2\ 5/2,\ T) = 2.0127 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.407}$$
$$D^5(3\ 2\ 5/2,\ T) = 1.2187 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.486}.$$

5.2. Polarization transfer rates

The collisional transfer transition probability is given by (Paper II; Sahal-Bréchot 1977):

$$\langle P^k(nlJ \rightarrow nlJ', b, v)\rangle_{av} = \sum_{\mu,\mu',\nu,\nu'} \langle nl\ J\ \mu|T|nl\ J'\ \mu'\rangle \quad \langle nl\ J\ \nu|T|nl\ J'\ \nu'\rangle^* \quad (16)$$
$$\sum_{\chi}(-1)^{J-J'+\mu-\mu'} \quad \begin{pmatrix} J & J & k \\ \nu & -\mu & \chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J' & J' & k \\ \nu' & -\mu' & \chi \end{pmatrix}.$$

As in equation (11), the polarization transfer rates $D^k(nlJ \rightarrow nlJ',\ T)$ follow from integration over the impact parameters and the velocities with a Maxwellian distribution.

Inelastic collisions with neutral hydrogen which leave the radiating atom in a final state $n'l'$ different from the initial one nl are neglected. Only the polarization transfer rates inside the subspace nl are taken into account. Our transfer rates between the levels $4p\ ^2P_{1/2} \rightarrow 4p\ ^2P_{3/2}$, $3d\ ^2D_{3/2} \rightarrow 3d\ ^2D_{5/2}$ ($D^k(4\ 1\ 1/2 \rightarrow 4\ 1\ 3/2,\ T)$ and $D^k1(4\ 1\ 1/2 \rightarrow 4\ 1\ 3/2,\ T)$) are presented in figures 7 and 8 respectively. $D^3(3\ 2\ 3/2 \rightarrow 3\ 2\ 5/2,\ T)$ did not obey a power law of the form $B\ T^{(1-\lambda)/2}$. However, we can provide the analytical expressions for the other non-zero transfer rates in rad. s^{-1}:

$$D^0(4\ 1\ 1/2 \rightarrow 4\ 1\ 3/2,\ T) = 4.0307 \times 10^{-15} n_H (\frac{T}{5000})^{0.407}$$
$$D^1(4\ 1\ 1/2 \rightarrow 4\ 1\ 3/2,\ T) = -1.1464 \times 10^{-15} n_H (\frac{T}{5000})^{0.314}$$
$$D^0(3\ 2\ 3/2 \rightarrow 3\ 2\ 5/2,\ T) = 1.8061 \times 10^{-15} n_H (\frac{T}{5000})^{0.392} \quad (17)$$
$$D^1(3\ 2\ 3/2 \rightarrow 3\ 2\ 5/2,\ T) = 1.6177 \times 10^{-16} n_H (\frac{T}{5000})^{1.401}$$
$$D^2(3\ 2\ 3/2 \rightarrow 3\ 2\ 5/2,\ T) = 8.6286 \times 10^{-16} n_H (\frac{T}{5000})^{0.490} \quad (18)$$

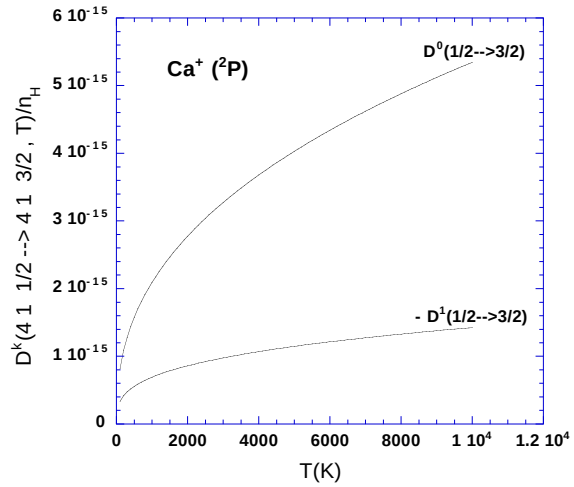

Fig. 7. Population and orientation transfer rates (k=0 and k=1), per unit H-atom density, as a function of temperature T. The rates are given in rad. m^3 s^{-1}.

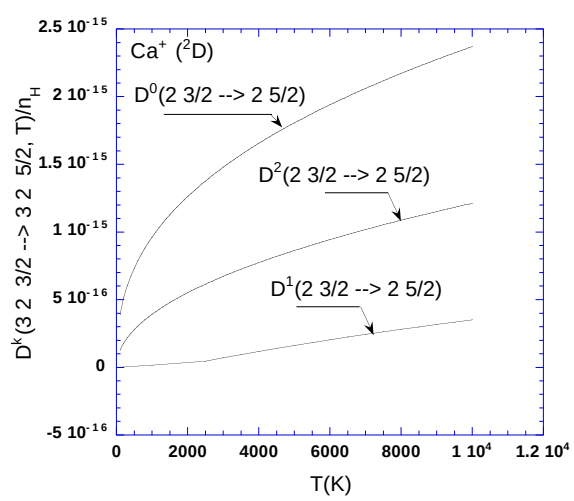

Fig. 8. Polarization transfer rates per unit H-atom density, $D^k(3\ 2\ 3/2 \rightarrow 3\ 2\ 5/2,\ T)/n_H$, as a function of temperature T. The rates are given in rad. m^3 s^{-1}.

6. Comparisons

It is important to notice that the depolarization rates $D^k(n\ l\ J,\ T)$ as defined in this work (equation 11) and the

relaxation rates $g^k(J)$ as defined by Kerkeni et al. (2003) (equation 2, section 3.2) are *not equivalent*. Kerkeni et al. (2003) defines the depolarization cross-section (or relaxation rate $g^k(J)$) as the sum of two terms: the term responsible exclusively for the depolarization of the level (nlJ) and the term corresponding to the fine structure transfer between the levels $(nlJ) \rightarrow (nlJ')$. In our definition, $D^k(n\ l\ J,\ T)$ is only the depolarization of the level (nlJ), the fine structure transfer is not included. We calculate separately the rates associated to fine structure transfer which are k-independent and proportional to the population transfer rates $D^0(n\ l\ J \rightarrow n\ l\ J',\ T)$ (equation 4 of Paper II).

For example, in accordance with our definition $D^0(n\ l\ J,\ T) \equiv 0$ but the relaxation rates $g^0(J)$ from Kerkeni et al. (2003) are not necessarily zero. In order to compare to the Kerkeni et al. (2003) results it is essential to substract the part of $g^k(J)$ associated to fine structure transfer ($g(J \rightarrow J')$ in Kerkeni et al. 2003). This it is nothing more than a difference in definitions. Nevertheless, this difference should be taken into account when writing the SEE. We now compare our alignment depolarization rates with the quantum chemistry depolarization rates (Kerkeni et al. 2003) and the alignment depolarization rates obtained by replacing the RSU potential with the Van der Waals potential, $V = -\frac{C_6}{R^6}$, where C_6 is taken from Table 1. Note that the latter rates differ from the usual Van der Waals formula for the rates, in that while they employ the van der Waals potential the collision dynamics are treated using our theory, and the C_6 value is accurately determined (whereas typically the approximation $C_6 = \alpha_H \langle p_2^2 \rangle$ is employed where α_H is the polarisability of hydrogen). In Figure 9 we show our alignment depolarization rates with quantum chemistry depolarization rates (Kerkeni et al. 2003) and the improved Van der Waals rates. We display only the $k = 2$ case which is related to the linear depolarization (alignment). Reference to Figure 9 shows that the Van der Waals potential significantly underestimates the depolarization cross section. Our results show rather good agreement with quantum chemistry calculations. In concrete terms, the percentage errors at T=5000 K with respect to quantum chemistry depolarization rates are 3.9 % for $D^2(4\ 1\ 3/2,\ T)/n_H$; 4.6 % for $D^2(3\ 2\ 3/2,\ T)/n_H$ and 7.3 % for $D^2(3\ 2\ 5/2,\ T)/n_H$. The errors for the other depolarization and transfer rates are similar to the errors for the destruction rates of alignment (in general, less than 15 %). This similarity is expected since all rates orginate from the same collisional processes.

7. Discussion

7.1. Dependence of depolarization cross-sections on interatomic separations

To assess the sensitivity of the calculations to the accuracy of the potentials at various separations we make calculations with potentials where we have introduced local perturbations. The interaction potential $(1s,\ 4p\sigma)$ is multiplied by a Gaussian magnification factor of the form (Anstee & O'Mara 1991):

$$G(R) = 1 + \exp(-(R - R_0)^2). \tag{19}$$

R_0 is the position where the variation of V_{eff} reaches its maximum value (the interaction potential $(1s,\ 4p\sigma)$ doubles). Figure 10 shows the depolarization cross-section calculated with varying R_0. It is clear that the values of R_0 inducing depolarization cross-section enhancement confirm the fundamental result found already for neutral atoms: the interactions of importance for the depolarization cross-section (or depolarization rate) calculations are the intermediate-range interactions (Papers I, II, and III). The principal differences between the RSU potentials and those from quantum chemistry occur at small interatomic separations. It is for this reason that we obtain rather good agreement with quantum chemistry calculations. The Van der Waals interaction potentials are inaccurate at the intermediate region, and this explains why these potentials underestimate the depolarization cross sections.

7.2. Dependence of depolarization rates on E_p

The depolarization and transfer rates for the $4p$ and $3d$ states are calculated for $E_p = -0.544$ and -1.236 respectively. As a check on the sensivity of our results to the precision of the calculations of E_p, we have calculated the destruction rate of alignment $D^2(4\ 1\ 3/2,\ 5000\text{K})$ by varying E_p in equation (9). Note that when E_p decreases, the interaction potential decreases and so $D^2(4\ 1\ 3/2,\ 5000\text{K})$ also decreases (Figure 11). The depolarization rate shows only an extremly weak variation with E_p. An $|E_p|$ variation of 25 %, with respect to the value $E_p = -0.544$, corresponds to a change of less than 5 % in the calculated depolarization rates. It should not concluded that this is a general property of the depolarization rates for all states of all ionised atoms. Reference to the Figure 11 shows a rather strong dependence of the depolarization rates on E_p for $|E_p| \leq 0.25$. We expect, however, that the value of $|E_p|$ is usually greater than 0.25 and the depolarization rates will not be greatly affected by possible error in the value of E_p (see Barklem & O'Mara 1998, 2000).

8. Application for Sr II 4078 Å line

The Sr II 4078 Å line was examined by Bianda et al. (1998), who wrote "*...The rather large uncertainty in the depolarizing collision rate introduces a corresponding uncertainty in the field-strength scale...*". These authors have used the traditional Van der Waals approach to calculate collisional rates. The 4078 Å line is the resonance line of SrII: $5s\ ^2S \rightarrow 5p\ ^2P$. We have computed the depolarization and polarization transfer rates of the levels $5p\ ^2P_{1/2}$ and $5p\ ^2P_{3/2}$ of SrII ion. The value of $E_p = -0.564$ for the level $5p\ ^2P$ of SrII was adopted from Barklem & O'Mara (2000). We applied our method to obtaining the rates which are shown in Figures 12 and 13. They were

found to again obey a power law $AT^{(1-\lambda)/2}$ and are given in rad. s^{-1} for $100 \leq T \leq 10000$K by:

– **SrII**($5p\ ^2P_{1/2}$)-**H**($1s$):

$$D^1(5\ 1\ 1/2,\ T) = 2.7196\ \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.428}. \quad (20)$$

– **SrII**($5p\ ^2P_{3/2}$)-**H**($1s$):

$$D^1(5\ 1\ 3/2,\ T) = 3.1560\ \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.418}$$
$$D^2(5\ 1\ 3/2,\ T) = 5.9776\ \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.406} \quad (21)$$
$$D^3(5\ 1\ 3/2,\ T) = 5.5413\ \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.410}.$$

Between the term levels $5p\ ^2P_{1/2}$ and $5p\ ^2P_{3/2}$ there are only two non-zero polarization transfer rates which are given in Figure 14. The analytical expressions for these rates given in rad. s^{-1} for $100 \leq T \leq 10000$ K are:

$$D^0(5\ 1\ 1/2 \rightarrow 5\ 1\ 3/2, T) = 4.6184 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.409}$$
$$D^1(5\ 1\ 1/2 \rightarrow 5\ 1\ 3/2, T) = -1.5309 \times 10^{-15}\ n_H\ (\frac{T}{5000})^{0.338} \quad (22)$$

9. Conclusion

We have adapted our semiclassical method of calculation of collisional depolarization of spectral lines of neutral atoms by atomic hydrogen to allow it to be used for singly ionised atoms. Comparison with recent quantum chemistry calculations for CaII indicates and error at T=5000 K of less than 5 %. This is an encouraging result which supports the validity of our semi-classical approach. Using this method we should be able to calculate depolarization rates of the levels involved in transitions of heavy ionised atoms like SrII, Ti II, Ce II, Fe II, Cr II, BaII... Calculations must proceed line by line because a suitable E_p value needs to be determined for each relevant state of the given ion. We have applied the method to calculate depolarization and polarization transfer rates for the SrII $5p\ ^2P$ state. These calculations should allow a more accurate theoretical interpretation of the observed linear polarization of the SrII 4078 Å line.

References

Anstee S.D., & O'Mara B.J., 1991, MNRAS, 253, 549
Anstee S.D. PhD thesis, Univ. Queensland, 1992
Anstee S.D., & O'Mara B.J., 1995, MNRAS, 276, 859
Barklem P.S., & O'Mara B.J., 1997, MNRAS, 290, 102
Barklem P.S., & O'Mara B.J., 1998, MNRAS, 296, 1057
Barklem P.S., & O'Mara B.J., 1998, MNRAS, 300, 863
Barklem P.S., & O'Mara B.J., 2000, MNRAS, 311, 535
Barklem P.S. PhD thesis , Univ. Queensland, 1998
Barklem P.S., Piskunov N., & O'Mara B.J., 2000, A&A, 142, 467
Bommier V., & Molodij G., 2002, A&A, 381, 241
Dalgarno A. & Williams D.A., 1962, Proc. Phy. Soc. (London), A69, 57
Derouich M., Sahal-Bréchot S., Barklem P.S., B. J. O'Mara, 2003a, A&A, 404, 763 (Paper I)
Derouich M., Sahal-Bréchot S., Barklem P.S., 2003b, A&A, 409, 369 (Paper II)
Derouich M., Sahal-Bréchot S., Barklem P.S., 2004, A&A, 414, 369 (Paper III)
Dittmann, O., Trujillo Bueno, J., Semel, M., & López Ariste, A. 2001, in Advanced Solar Polarimetry: Theory, Observation, and Instrumentation, ed. M. Sigwarth, ASP Conf. Ser., 236, 125
Fano U., & Racah G., 1959, Irreducible Tensorial Sets (New York; Academic Press)
Fano U., 1963, Phys. Rev., 131, 259
Gandorfer A., 2000, The Second Solar Spectrum: A high spectral resolution polarimetric survey of scattering polarization at the solar limb in graphical representation, vol. 1: 4625 Å to 6995 Å (Hochschulverlag AG an der ETH Zurich)
Gandorfer A., 2002, The Second Solar Spectrum: A high spectral resolution polarimetric survey of scattering polarization at the solar limb in graphical representation, vol. 2: 3910 Å to 4630 Å (Hochschulverlag AG an der ETH Zurich)
Goodisman J., 1973, Diatomic Interaction Potential Theory (New York; Academic Press)
Kerkeni B., 2003, A&A, 402, 5
Manso Sainz R., & Trujillo Bueno J., 2001, in Advanced Solar Polarimetry: Theory, Observation, and Instrumentation, ed. M. Sigwarth, ASP Conf. Ser., 236, 213
Manso Sainz R., & Landi Degl'Innocenti E., 2002, A&A, 394, 1093
Manso Sainz R., & Trujillo Bueno J., 2003, Phys. Rev. Lett., 91, 11
Messiah A., 1961, Mécanique Quantique (Paris: Dunod)
Sahal-Bréchot S., 1977, ApJ., 213, 887
Seaton M.J., 1958, MNRAS, 118, 504
Stenflo, J.O., Baur, T.G., Elmore, D.F., 1980, A&A 84, 60
Stenflo, J.O., Twerenbold, D., Harvey, J.W., 1983a, A&A 52, 161 NASA ADS
Stenflo, J.O., Twerenbold, D., Harvey, J.W., Brault, J.W., 1983b, A&AS 54, 505
Stenflo J.O., & Keller C.U., 1997, A&A, 321, 927
Stenflo J.O., Keller C.U., & Gandorfer A., 2000, A&A, 355, 789
Stenflo J.O., 2001, in Advanced Solar Polarimetry: Theory, Observation, and Instrumentation, ed. M. Sigwarth (San Francisco: Astronomical Society of the Pacific), ASP Conf. Ser., 236, 97
Trujillo Bueno J., & Collados M., Paltou F., Molodij G., in: Advanced Solar Polarimetry, Proc. 20th NSO/Sac Peak Summer Workshop. M. Sigwarth (ed.), ASP Conf. Ser. 236, 141
Trujillo Bueno J., & Manso Sainz R., 2001, in Magnetic Fields Across the Hertzsprung-Russell Diagram, ed. G. Mathys, S. K. Solanki, & D. T. Wickramasinghe (San Francisco: Astronomical Society of the Pacific), ASP Conf. Ser., 248, 83
Unsöld A.L., 1927, Zeitschrit für Physik, 43, 574
Unsöld A.L., 1955, Physik der Stern Atmosphären (Zweite Auflage)

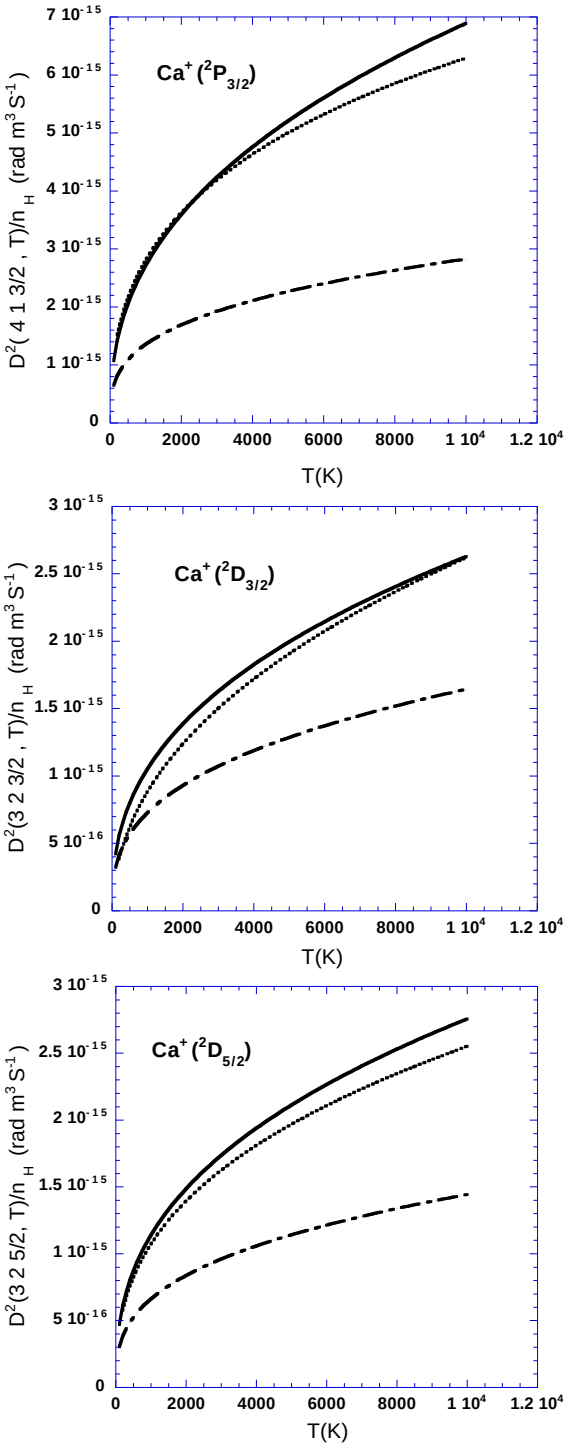

Fig. 9. Depolarization rates for $k = 2$ as a function of temperature. Full lines: our results; dotted lines: quantum chemistry calculations (Kerkeni 2003); dot-dashed lines Van der Waals approximation.

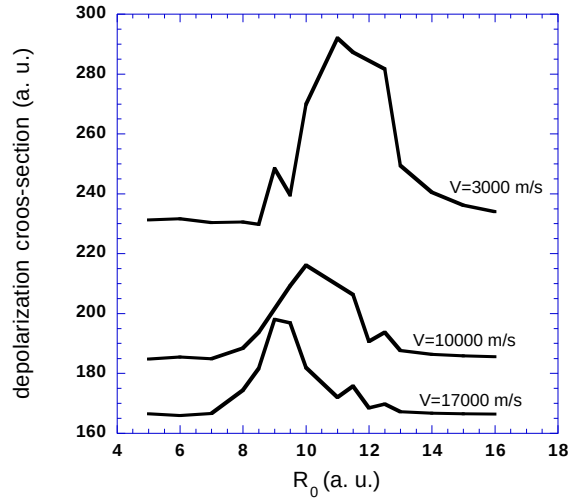

Fig. 10. Depolarization cross section enhancement due to a Gaussian local perturbation of the potential. Cross sections are calculated for the relative velocities: 3 km s^{-1}, 10 km s^{-1} and 17 km s^{-1}.

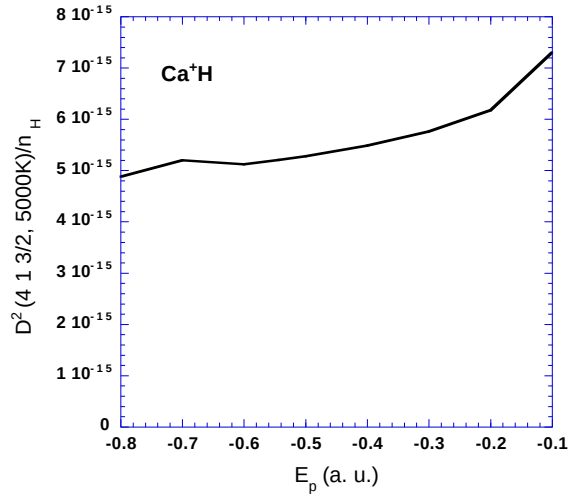

Fig. 11. Dependence on E_p of the destruction rate of alignment $D^2(4\ 1\ 3/2,\ 5000\mathrm{K})/n_H$.

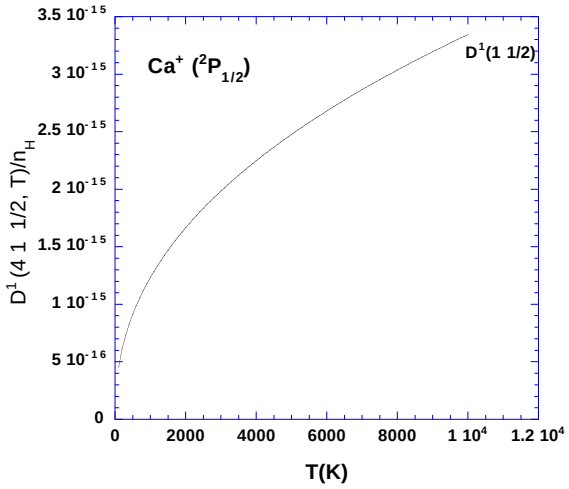

Fig. 12. Destruction rate of orientation per unit H-atom density for the SrII ion, $D^1(5\ 1\ 1/2,\ T)/n_H$, as a function of the temperature of the medium, T. $D^1(5\ 1\ 1/2,\ T)/n_H$ is given in rad. s^{-1}.

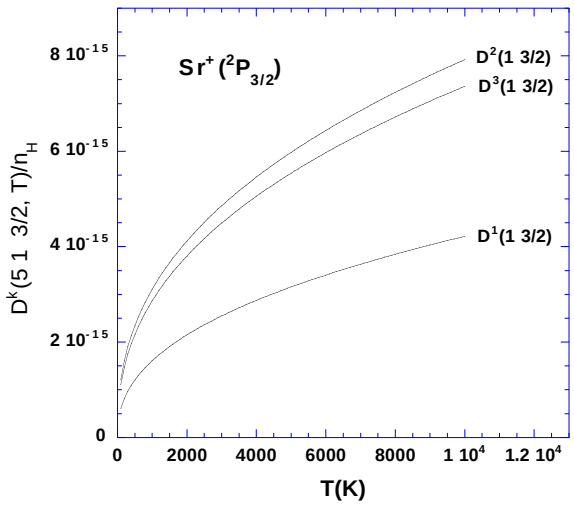

Fig. 13. Depolarization rates, $D^k(5\ 1\ 3/2,\ T)/n_H$ (k=1, 2, and 3), as a function of temperature T. $D^k(5\ 1\ 3/2,\ T)/n_H$ are given in rad. m^3 s^{-1}.

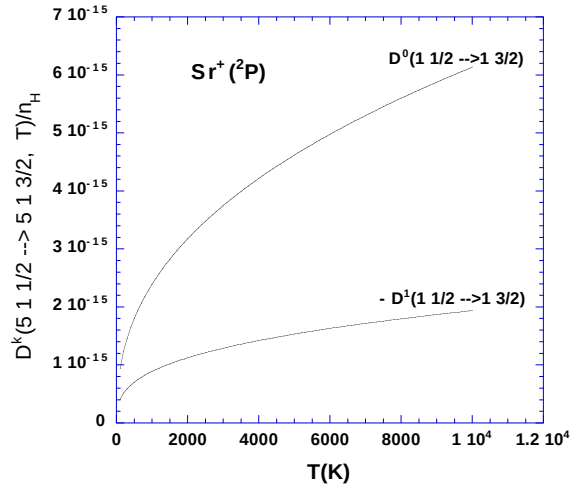

Fig. 14. Population and orientation transfer rates (k=0 and k=1) for the SrII ion, per unit H-atom density, as a function of temperature T. The rates are given in rad. m^3 s^{-1}.

Astronomy & Astrophysics manuscript no. May 29, 2004
(DOI: will be inserted by hand later)

Interpretation of second solar spectrum observations of the Sr I 4607 Å line in a quiet region: turbulent magnetic field strength determination ⋆

V. Bommier[1], M. Derouich[1], E. Landi Degl'Innocenti[2], G. Molodij[3], and S. Sahal-Bréchot[1]

[1] Laboratoire d'Étude du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique, CNRS UMR 8112 – LERMA, Observatoire de Paris, Section de Meudon, F-92195 Meudon, France
[2] Università degli Studi di Firenze, Dipartimento di Astronomia e Scienza dello Spazio, Largo E. Fermi 2, I-50125 Firenze, Italy
[3] Laboratoire d'Études Spatiales et d'Instrumentation en Astrophysique, CNRS UMR 8645 – LESIA, Observatoire de Paris, Section de Meudon, F-92195 Meudon, France

Received 2 December 2003 / in revision

Abstract.
This paper is devoted to present and to interpret some observations of the limb polarization of Sr I 4607 Å obtained with the spectropolarimeter of the french-italian telescope THEMIS in quiet regions close to the solar North Pole on 2002 December 7, 8 and 9. The linear polarization has been measured for a series of limb distances ranging from 4 to 160 arcsec, corresponding to heights of optical depth unity in the line core ranging from about 330 to 220 km, respectively, above the $\tau_{5000} = 1$ level. To increase the polarimetric sensitivity, the data have been averaged along the spectrograph slit (one arcmin long) set parallel to the solar limb. Since the data show no rotation of the linear polarization direction with respect to the limb direction, the observed depolarization is ascribed to the Hanle effect of a turbulent weak magnetic field, the zero-field polarization being derived from a model. The interpretation is performed by means of an algorithm which describes the process of line formation in terms of the atomic density matrix formalism, the solar atmosphere being described by an empirical, plane-parallel model. The collisional rates entering the model (inelastic collisions with electrons, elastic depolarizing collisions with neutral hydrogen), have been computed by applying fast semi-classical methods having a typical accuracy of the order of 20% or better (see Derouich, 2004). We assume a unimodal distribution for the intensity of the turbulent field, and we find that the determination of this parameter strongly depends on the microturbulent and macroturbulent velocities that are retrieved from a fit to the intensity profiles. Our best adjustments between theoretical and observed profiles, performed independently for each limb distance, give results that are practically constant with depth, with close average values of 1.87 km/s for the microturbulent velocity, 1.78 km/s for the macroturbulent velocity and 46 Gauss for the turbulent field strength. The turbulent field strength is found to be twice larger than that found in the most recent determination of Faurobert et al. (2001). This is due to the fact that we have adjusted both microturbulent and macroturbulent velocities that influence mainly the width and depth of the profile respectively, whereas Faurobert et al. have adjusted the macroturbulent velocity only, the microturbulent velocity being taken from a model. We think that the two parameters are necessary for a correct adjustement of the theoretical profile to the observed one. The sensitive effect of the velocities determination on the turbulent magnetic field determination is also underlined by the recent work of Shchukina & Trujillo Bueno (2003). Besides, we show that an inaccuracy by a factor of 2 on the depolarizing collision rate lead to 20-30% inaccuracy only on the magnetic field determination. Finally, a trend for a decrease of the turbulent magnetic field strength with height can eventually be assessed in our results, with a gradient of -0.12 Gauss/km, but the number of observed points (nine) is too low for a definite conclusion. Further observations with a higher number of points are needed.

Key words. Atomic Processes – Line: formation – Line: profiles – Sun: magnetic fields – Polarization – Radiative transfer

Send offprint requests to: V. Bommier

⋆ based on observations made with the french-italian telescope THEMIS operated by CNRS and CNR on the island of Tenerife in the spanish Observatorio del Teide of the Instituto de Astrofísica de Canarias.

Correspondence to: V.Bommier@obspm.fr

1. Introduction

Close to the solar limb, spectral lines are linearly polarized. This phenomenon is known since a long time and is thought to be due to the scattering by atoms of the solar radiation which results in being particularly anisotropic in the top layers of the solar atmosphere. The spectrum of the linear polarization, for which the name of 'second solar spectrum' has been suggested by V.V. Ivanov during the First Solar Polarization Workshop (St Petersburg, Russia, 8-12 May 1995), shows structures very different from those of the intensity spectrum, and is therefore rich in new information, particularly on symmetry-breaking features like velocity or magnetic fields. The Sr I 4607 Å line was found to be one of the most polarized of the second solar spectrum (Stenflo et al., 1983a, 1983b), so that further observations have been devoted to precise its center-to-limb behavior (Stenflo et al., 1997), in particular with the spectropolarimeter of the french-italian THEMIS solar telescope (Faurobert et al., 2001, Trujillo Bueno et al., 2001, Bommier & Molodij, 2002, and the present observations). An atlas of the second solar spectrum has also been obtained with the ZIMPOL II polarimeter at IRSOL, Locarno (Gandorfer, 2000, 2002). This atlas provides a further observation of the linear polarization of Sr I 4607 Å at 5 arcsec from the solar limb.

When observing outside active regions, the linear polarization of the Sr I 4607 Å line, which is of the order of 1% at 5 arcsec from the solar limb, has been found to be parallel to the limb direction, as confirmed by the present observations (see Sect. 2 and Fig. 1). When observing with low spatial resolution ($\sim 2''$), no rotation of the polarization direction with respect to the limb direction is observed (see also Trujillo Bueno et al., 2001, and Stenflo, 2002). Such a rotation would be introduced in the scattering polarization by the presence of a deterministic, weak magnetic field (Hanle effect). These features make this line particularly suitable for attempting a theoretical interpretation of its polarization degree. Fortunately, the 2-level approximation is suitable for its interpretation because the 4607 Å line is the resonance line of the Sr I atom, $5s^2\ {}^1S_0 \rightarrow 5s5p\ {}^1P_1$, with Landé factor of the upper level $g = 1$. Depolarizing effects due to hyperfine structure can be safely neglected since the only isotope of Sr having nuclear spin $I \neq 0$ has a very low natural abundance (7%). Relatively simple polarized radiative transfer models have been settled up, which show that the theoretical linear polarization degree, evaluated for a plane-parallel atmosphere in the absence of magnetic field, is higher than the observed one. This resulting depolarization effect (joined to the fact that no rotation of the polarization direction is observed) has been ascribed to the Hanle effect due to a turbulent weak magnetic field (see the first model in Faurobert-Scholl, 1993, and the most recent one developed for the interpretation of the THEMIS data, in Faurobert et al., 2001).

To model the magnetic depolarization, the further depolarization effect due to collisions of the Sr atoms with neutral hydrogen atoms has to be taken into account. The corresponding rates were poorly known, but quantum chemistry calculations have been recently developed (see the first calculations and resulting interpretation in Faurobert-Scholl et al., 1995), and are now available for a better diagnostic of the turbulent magnetic field.

The aim of the present work is threefold:

- achieve precise polarimetric observations with the THEMIS telescope at several distances from the limb by using the beam exchange technique described in Bommier & Molodij (2002). We have obtained measurements ranging from 4 to 160 arcsec from the solar limb. The slit has been positioned parallel to the solar limb in a quiet region (North Pole), and the data have been averaged along the slit to increase polarimetric sensitivity. Our results display the linear polarization Stokes parameters, showing in particular the absence of rotation of the polarization direction (see Sect. 2 and Fig. 1).
- apply the atomic density matrix method for polarized radiative transfer developed by Landi Degl'Innocenti et al. (1990) to model the line polarization. Though based on a different approach for solving the coupled equations of statistical equilibrium and non-LTE radiative transfer, this method is in principle equivalent to the 'scattering method' used by Faurobert-Scholl (1993), and should obviously produce the same results. Complete frequency redistribution is assumed (see a more detailed description of the method in Sect. 3).
- develop fast semi-classical methods for computing the collisional rates, validated by comparison of their results with heavier methods based on quantum chemistry. The interest of these approximate methods is their ability to evaluate collisional rates with a typical accuracy of about 20% or better, without any need of using heavier and more time-consuming quantum chemistry methods. Such a semi-classical method has been developed for isotropic collisions of neutral atoms or charged ions with electrons by Seaton (1962) and Sahal-Bréchot (1969a, 1969b). We have applied this method for the evaluation of inelastic collisional rates. More recently, a further semi-classical method has been developed for isotropic collisions of atoms with neutral hydrogen by Anstee & O'Mara (1991, 1995), and generalized to the evaluation of collisional elastic depolarization cross-sections by Derouich (2004) and Derouich et al. (2003). We have applied this last method for evaluating the depolarizing rates due to elastic collisions with neutral hydrogen atoms (see Sect. 3).

The comparison between our observations and the polarization computed from a plane-parallel atmosphere has confirmed the existence of a depolarizing effect that can be ascribed to a turbulent weak magnetic field. If, as a working hypothesis, the turbulent field is supposed to be unimodal, the determination of its intensity, that can be

achieved by comparing observations with model calculations, is found to be strongly related to the values of the microturbulent and macroturbulent velocities that modify the width and height of the profiles. When we use the same values of both microturbulent (1 km/s) and macroturbulent (2.5 km/s) velocities as those used by Faurobert et al. (2001), we recover turbulent field strengths in the range 14-28 Gauss, similar to their values (20-30 Gauss). However, our best adjustment between observed and computed intensity profiles is obtained for a quite different couple of values: 1.87 km/s for the microturbulent velocity and 1.78 km/s for the macroturbulent one, because the intensity profile fitting has been achieved with these two free parameters, which act mainly on the line width and depth respectively (Faurobert et al., 2001, have introduced one free parameter only, the macroturbulent velocity, the microturbulent velocity being taken from the atmosphere model). Using these new values, the comparison between the observed and computed polarization profiles leads to a turbulent field strength of 36-54 Gauss (average 46 Gauss), twice higher (see Sect. 5 and Table 1).

Recently, Shchukina & Trujillo Bueno (2003) have investigated two-level and multilevel atomic models for strontium in the FAL-C semi-empirical 1D model and in a more realistic 3D model resulting from hydrodynamical simulations. Their conclusions for the two-level modeling case in the FAL-C semi-empirical model put in evidence the sensitive effect of the velocities determination on the turbulent magnetic field determination. They work with only one free parameter, the macroturbulent velocity only, the microturbulent velocity being taken from the atmospheric model, and they show that by adjusting this single parameter, it is impossible to fit the whole intensity profile. In the present analysis, we arrive at the same conclusion. From the 3D simulation on the contrary, they do not need to use adjustable parameters and they derive a turbulent magnetic field strength of about 60 Gauss, slightly higher than the present determination.

2. Observations and data reduction

The observations have been obtained with the spectropolarimeter of the THEMIS solar telescope (Izaña, Tenerife, Spain), on 2002, December 7,8 and 9.

2.1. Observational procedure

The observational procedure followed is very similar to the one described in Bommier & Molodij (2002). The slit, 1 arcmin long and 0.5 arcsec wide, was positioned parallel to the solar limb, at the North Pole where no magnetic activity was apparently present (the data have been further averaged along the slit to increase polarimetric sensitivity). The observations were obtained for a series of distances between the slit and the limb ranging from 4 to 160 arcsec, corresponding to heliocentric angles θ from 85° to 55° (see Table 1). Apart from the 4 arcsec limb distance, the limb was not visible on the slit-view camera, so that the

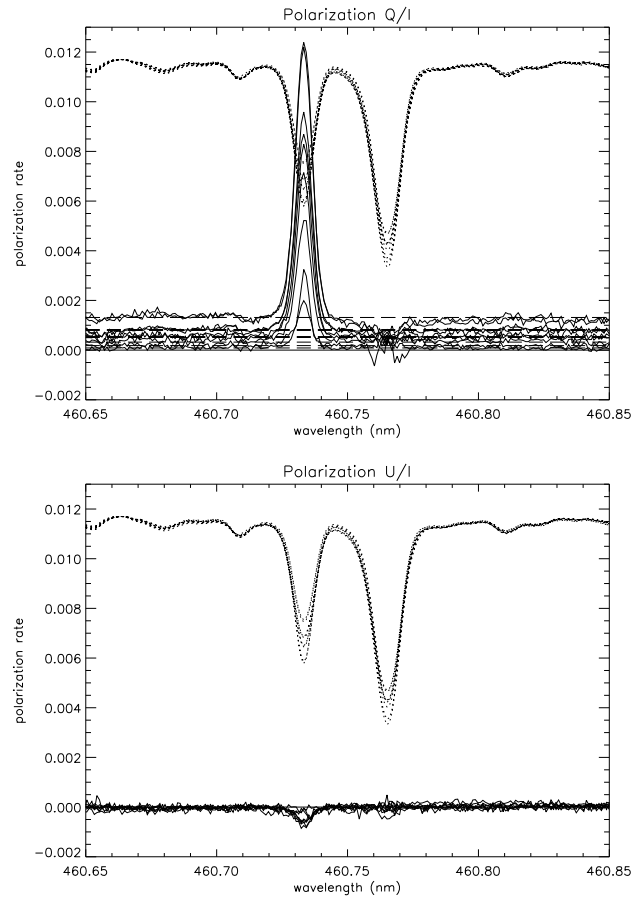

Fig. 1. Superimposed observations for all the limb distances listed in Table 1. The Stokes parameters Q and U are expressed in the limb reference frame. Dotted lines: intensity I in arbitrary units. The slit has been positioned parallel to the solar limb and the data have been averaged along the slit (one arcmin long) to increase the polarimetric sensitivity. The Sr I line is 460.7333 nm and the neighboring line at 460.7651 nm is a Fe I line that depolarizes the continuum. The broken line is the theoretical value of the limb polarization to which the observed continuum polarization has been superimposed (see text for details)

following procedure was used for fixing the limb distance: the slit was firstly positioned as well as possible at the intensity inflexion point as shown by a radial cut in the slit-view real time image (taken in the continuum at 4307 Å). This inflexion point was considered as the limb position. Then, the slit was moved at the desired limb distance by performing a radial displacement with the pursuit tool of the telescope.

One of the novelty with respect to the 2000 campaign described in Bommier & Molodij (2002), was that the polarization analyzer had been replaced by a new version that allows the beam exchange in any of the polarization Stokes parameters, so that we sequentially recorded the images corresponding to the 6 analyzer positions, respectively denoted as $+Q, -Q, +U, -U, +V, -V$. The corre-

date	$d_{\rm limb}$ arcsec	μ $\cos\theta$	$I_{\rm cent}/I_{\rm cont}$	p %	$p_{\rm cont}$ %	h km	$v_{\rm micro}$ km/s	$v_{\rm macro}$ km/s	B Gauss	Γ
2002/12/07	4	0.091	0.647	1.244	0.131	328	1.80	1.75	39	1.72
2002/12/08	4	0.091	0.642	1.225	0.131	328	1.95	1.75	42	1.85
2002/12/07	10	0.144	0.587	0.959	0.081	300	1.90	1.55	44	1.93
2002/12/08	10	0.144	0.587	0.869	0.081	300	2.10	1.75	50	2.20
2002/12/08	20	0.203	0.554	0.829	0.053	280	1.95	1.80	36	1.57
2002/12/09	20	0.203	0.558	0.715	0.053	280	1.75	1.65	46	2.00
2002/12/09	40	0.286	0.516	0.522	0.032	260	2.05	1.90	50	2.20
2002/12/09	80	0.400	0.503	0.325	0.018	239	1.70	1.90	54	2.37
2002/12/09	160	0.553	0.496	0.199	0.009	220	1.65	2.00	53	2.33

Table 1. Observational data and results of interpretation. From left to right: observational data: date, limb distance $d_{\rm limb}$, cosine of the heliocentric angle μ, ratio of line center intensity to the neighboring continuum intensity $I_{\rm cent}/I_{\rm cont}$, line center linear polarization degree p (Q/I of Fig. 1), theoretical continuum polarization degree $p_{\rm cont}$ (see text); results of interpretation: height of formation of the line center above the $\tau_{5000} = 1$ level h (see text for its definition), microturbulent velocity $v_{\rm micro}$, macroturbulent velocity $v_{\rm macro}$, mircoturbulent magnetic field strength B, field strength in Hanle relative units (Γ parameter, see Sect. 3.2), where the value 1 corresponds to the maximum of sensitivity.

name	QWP1	QWP2	Output
$+Q$	$+45°$	$-45°$	$I \pm Q$
$+U$	$0°$	$+45°$	$I \pm U$
$+V$	$-45°$	$0°$	$I \pm V$
$-Q$	$+45°$	$+45°$	$I \mp Q$
$-U$	$0°$	$-45°$	$I \mp U$
$-V$	$+45°$	$0°$	$I \mp V$

Table 2. Positions of the two quarter-wave plates (QWP1 and QWP2) of the analyzer, and resulting output signals after the beam splitter (last column). The first column gives the conventional name of the setting of the polarimeter. QWP1 is the first plate encountered by the Sun's light.

sponding quarter-wave plates positions are listed in Table 2 (the Stokes parameter are here given in the analyzer reference frame, which is rotated 45° from the limb reference frame). These plates positions are the ones that give less fringes (Bommier & Molodij, 2002, for U, and Semel, 2003, for Q).

As in Bommier & Molodij (2002), the acquisition of limb images and flat field images were interleaved, in order to retrieve the same fringes positions on both limb and flat field images. Fringes can thus be eliminated from the limb images by using the flat field images (fringes displacements are probably correlated to the telescope drifts, that we manually correct at each tipping). On December 7, we interleaved packages of 10 sequences of 6 limb and flat images, twice, so that we have 20×6 limb and flat images for the two limb distances 4 and 10 arcsec observed on that day. On December 8, the packages have been of 5 sequences of 6 images, interleaved four times so that we have 20×6 limb and flat images for the two limb positions 4 and 10 arcsec, and interleaved two times so that we have 10×6 limb and flat images for the limb distance 20 arcsec. On December 9, we interleaved packages of 5 sequences of 6 limb and flat images, twice, so that we have 10×6 limb and flat images at 20, 40, 80 and 160 arcsec from the solar limb. As usual, the flat field images were recorded by rapidly moving the solar image on the spectrograph slit along a random ellipse centered on disk center (or elsewhere in a quiet region if a sunspot was found in the vicinity of disk center). The integration time was of 13 s on December 7,8 and of 11 s on December 9.

Two different cameras were used to acquire the images in the two polarization states obtained after the beam splitter, $I+X$ and $I-X$, where X is one of the polarization Stokes parameters. The magnification factor of the camera optics was about 1/2.

2.2. Data reduction and results

The data reduction technique and methods are those described in Bommier & Rayrole (2002) and Bommier & Molodij (2002), apart from the generalized beam exchange method that has become useless with the new polarization analyzer, where the usual beam exchange is available for the three polarization Stokes parameters Q, U and V. One of the characteristics of our method is that the data are averaged along the slit as soon as possible in the reduction process, just after line destretching and flat field correction, and before the polarization analysis (profile subtraction) which includes a correction of the difference in dispersion between the two channels.

The results of the polarization analysis are given in Fig. 1, where the Stokes parameters are now expressed in the limb reference frame, and where the dotted line is the intensity profile in arbitrary units. The intensity and polarization profiles are superimposed for all the different limb distances. The continuum polarization degree has been arbitrarily adjusted to the theoretical value, which is 0 for U/I. For Q/I, we have taken the theoretical value of the continuum polarization as given by Fluri & Stenflo (1999), following the method described in Bommier & Molodij (2002). The Sr I line is located at 4607.333 Å, and the neighbouring line is a Fe I line with wavelength 4607.651 Å. In Q/I, the polarization at the different limb distances is visible in the Sr I line (the polarization decreases when the limb distance increases), and it is clearly

visible in the figure that the Fe I line 'depolarizes the continuum', as put in evidence by Stenflo et al. (1997). No significant polarization is found in U/I, so that no rotation of the linear polarization direction with respect to the zero magnetic field direction (the limb direction) is observed, in full agreement with the observational results of Trujillo Bueno et al. (2001) obtained at only one limb distance.

The values of the line center polarization degree (Q/I, now denoted as p) is given in Table 1 for the different limb distances. The theoretical continuum polarization degree, $p_{\rm cont}$, that we have used to set the value of the observed continuum polarization, is also given. It can be seen that these polarization degrees are in good agreement with those of Faurobert et al. (2001) obtained in 2000 with THEMIS, and with the one observed in 2001 by Gandorfer (2002) with ZIMPOL II at IRSOL, Locarno. No difference is also found with our THEMIS 2000 campaign (Bommier & Molodij, 2002), thus raising serious doubts about the possibility of a cyclic variation suggested by the difference with the 1994 data of Stenflo et al. (1997) showing a polarization degree larger by a factor 1.5. Further investigation is however necessary to give firm conclusions on the possible 11-year cyclic variation of the polarization.

Table 1 also displays the ratio $I_{\rm cent}/I_{\rm cont}$ of the line center intensity to the neighboring continuum intensity, for the various limb distances.

3. Model for the formation of the line polarization

The diagnostic of the various quantities (microturbulent or macroturbulent velocity fields, magnetic field) is done by comparing the observed and theoretical polarization profiles. The present section is devoted to describe the theoretical methods used for the interpretation of the observed profiles and for fitting the data by varying the relevant parameters. A density matrix polarized radiative transfer code has been used to this purpose. Since no rotation of the linear polarization direction with respect to the limb direction is observed, a unimodal, turbulent magnetic field has been assumed, as proposed by Stenflo (1982) and Faurobert-Scholl (1993). A plane-parallel atmosphere has also been assumed.

3.1. Polarized radiative transfer in the atomic density matrix formalism

As already stated in the introduction, the 2-level atom approximation can be applied to the description of the Sr I 4607 Å line formation. Moreover, as stated by Faurobert-Scholl (1993), partial frequency redistribution effects are not very important for this line, so that complete redistribution can be safely assumed. Under these conditions, the density matrix method for polarized radiative transfer in the presence of weak magnetic fields (Hanle effect), developed by Landi Degl'Innocenti et al. (1990), and applied by Bommier et al. (1991) to the case of a plane-parallel isothermal and isodense atmosphere permeated by a deterministic magnetic field, can be generalized to the case of a turbulent weak magnetic field in a model atmosphere.

In the density matrix formalism of Landi Degl'Innocenti et al. (1990), the quantities to be computed are the atomic density matrix elements of the upper level, expressed in the irreducible tensors basis (ρ^K_Q). They obey an integral equation obtained by reporting the formal solution of the polarized radiative transfer equation into the statistical equilibrium equation for the atomic density matrix elements. On the contrary, in the 'scattering method' used by Faurobert-Scholl (1993, see also Rees, 1978, Faurobert-Scholl & Frisch, 1989 , Faurobert-Scholl, 1991), an integral equation is obtained for the generalized source function by reporting the formal solution of the statistical equilibrium equation (which is very simple for a 2-level atom), into the transfer equation. Though both methods follow different strategies, they are in principle equivalent so that no difference can be expected in the results. The generalized source function and the density matrix elements are fully equivalent, apart from a normalization factor, in the complete redistribution approximation (Landi Degl'Innocenti et al., 1990, Landi Degl'Innocenti & Bommier, 1994, Frisch 1998).

The continuous absorption has been added to the formalism, introducing thus the additional parameter β defined by

$$\beta = \frac{k_c}{k_L} \tag{1}$$

which is the ratio between the continuous absorption coefficient k_c and the line absorption coefficient k_L, which is equal to the $\eta^{(0)}$ coefficient of Landi Degl'Innocenti et al. (1991, Eq. (25)), and which is also η_0 of Landi Degl'Innocenti et al. (1990, Eq. (13)).

To numerically solve the integral equation, the density matrix elements have to be discretized over a grid of optical depth points. As described in Bommier & Landi Degl'Innocenti (1998), several interpolation methods for the density matrix elements between the grid points have been envisaged: linear, quadratic, or cubic spline. Though the quadratic and cubic spline interpolations converge much faster and give accurate results in the isothermal and isodense atmosphere case (analytical tests are provided by the $\sqrt{\varepsilon}$-law, see Landi Degl'Innocenti & Bommier, 1994), they have to be abandoned due to numerical instability in the model atmosphere case, where we have then preferred the linear interpolation, the only one that is stable.

3.2. Microturbulent magnetic field

The magnetic field is assumed to be unimodal and microturbulent, which means that, at any optical depth, the magnetic field is constant in intensity and has an isotropic distribution of directions. Moreover, we suppose that the correlation length of the 'microturbulent eddies' is infinitely small, so that the direction of the magnetic field

at optical depth τ is completely uncorrelated with the direction at optical depth τ' , no matter how close the two points are in space.

The spatial average leading to the turbulent magnetic field model cannot be directly performed in the formalism developed in Landi Degl'Innocenti et al. (1990), because the magnetic kernel, which has to be angle averaged at each optical depth τ, is multiplied by the density matrix element at the same optical depth τ (see Eq. (8) of that paper). To derive the turbulent field expressions, a different treatment of the magnetic kernel has then to be used, similarly to what done by Trujillo Bueno and Manso Sainz (1999): starting from the general density matrix integral equation as given for instance in Eq. (55) of Landi Degl'Innocenti et al. (1991), the first term in the r.h.s., which is the Hanle effect term, has to be moved to the l.h.s., so that the whole equation can then be divided by $1+\varepsilon+\delta^{(K)}+\mathrm{i}\Gamma Q$ (see the meaning of the symbols in Landi Degl'Innocenti et al., 1990, 1991). The inverse of this term is at the origin of a new magnetic kernel, at optical depth τ, that now multiplies the density matrix element at optical depth τ', so that the angular average can be performed on both terms independently. Before angle averaging, the equation thus obtained, which is expressed in the magnetic field reference frame, has to be transformed to the fixed reference frame of the atmosphere. This can be done by following the method described in Landi Degl'Innocenti et al. (1990). The angular average can then be performed, and it is obtained that, in the case of the microturbulent magnetic field, the system of integral equations is the same as the one in a non-magnetic atmosphere (involving ρ_0^0 and ρ_0^2 only), except from the fact that the r.h.s. of the equation giving $\rho_0^2(\tau)$ has now to be multiplied by the quantity $\mu_2(\tau)$

$$\mu_2(\tau) = \frac{1}{5}\left[1 + \frac{2}{1+(\Gamma')^2} + \frac{2}{1+4\,(\Gamma')^2}\right] , \tag{2}$$

where Γ' is the reduced magnetic field strength as defined in Eq. (59) of Landi Degl'Innocenti et al. (1990), which has to be rewritten here as

$$\Gamma' = \frac{\Gamma}{1+\varepsilon+\delta^{(2)}} = \frac{g_{J'} e_0 B}{2mc(A + C_{J'J} + D^{(2)})} \tag{3}$$

for correcting a misprint about the Landé factor $g_{J'}$ ($\Gamma = (g_{J'} e_0 B)/(2mcA)$ is the value of the magnetic field B in relative units; A, $C_{J'J}$ and $D^{(2)}$ are respectively: the Einstein coefficient for spontaneous emission, the collisional de-excitation coefficient and the collisional depolarizing rate). It has to be noted that the test provided by the analytical $\sqrt{\varepsilon}$-law, as detailed by Landi Degl'Innocenti & Bommier for arbitrary magnetic fields (1994), is no longer valid in the case of a microturbulent magnetic field.

3.3. Atmospheric model

The parameters entering the integral equation for the density-matrix elements, and that are allowed to vary with depth, are the following ones: a) the temperature T that determines the value of the Planck function; b) the coefficient ε' describing inelastic collisions by electrons, defined by

$$\varepsilon' = \frac{C_{J'J}}{A + C_{J'J}} , \tag{4}$$

where A is the Einstein coefficient for spontaneous deexcitation and $C_{J'J}$ is the collisional de-excitation coefficient depending on temperature and electron density; and c) the upper level depolarizing rate $D^{(2)}$ due to elastic collisions with neutral hydrogen atoms, that depends on the temperature and neutral hydrogen density. The temperature, electron pressure and gas pressure have been taken from the Maltby et al. Quiet Sun Photospheric Reference Model (Maltby et al., 1986), extrapolated downwards beyond -70 km to -450 km below the $\tau_{5000} = 1$ level (IAC private communication). Above -70 km, this model is very similar to the Quiet Sun FAL C (Fontenla et al., 1993).

The introduction of the depth-dependence of the β coefficient (ratio of the continuum to the line absorption coefficient defined in Eq. (1)) requires particular attention, because the argument of the integro-exponential functions E_n entering the kernels K of the integral equations (see Eqs. (56) and (61) of Landi Degl'Innocenti et al., 1990) depends on both β and the absorption profile $\phi(x)$ where x is the frequency: by introducing the continuous absorption in the formalism, $E_n\left[\tau\phi(x)\right]$ has to be replaced by $E_n\left[\tau\left(\phi(x)+\beta\right)\right]$ for a constant β, and by

$$E_n\left[\int_0^\tau \left(\phi(x) + \beta\left(\tau'\right)\right) \mathrm{d}\tau'\right] \tag{5}$$

for a depth-dependent β. We have applied the trapezoidal rule to evaluate the integral that now appears as the argument of the integro-exponential function.

Finally, both the intensity of the microturbulent magnetic field and the line Doppler width $\Delta\nu_{\mathrm{D}}$ (which includes microturbulent velocity) have been assumed to be depth-independent. The generalization to depth-dependent fields (turbulent or not) can be easily handled by our theoretical approach, whereas the introduction of a depth-dependent Doppler width would imply a heavy modification of our codes.

3.4. Evaluation of the grid of line center optical depths

The numerical solution of the integral equations for the density matrix elements requires the determination of the line opacity with respect to the continuum opacity. The continuum absorption coefficient has been evaluated as in the MALIP code of Landi Degl'Innocenti (1976), i.e. by including H^- bound-free, H^- free-free, neutral hydrogen atom opacity, Rayleigh scattering on H atoms, and Thompson scattering on free electrons. For the line center optical depth evaluation, atomic data have been taken from Allen (1973), and partition functions from Wittmann (IAC, private communication). The strontium abundance has been assumed to be 2.93 (in the usual logarithmic scale

where the abundance of hydrogen is 12). LTE ionization equilibrium has been assumed by using the Saha's law for determining the Sr II and Sr III abundances with respect to Sr I. Finally, departures from LTE in the ionization equilibrium have been simulated by applying the Saha's law with a constant 'radiation temperature' of 5100 °K instead of the electron temperature provided by the atmosphere model, for depths higher than the one corresponding to $\tau_{5000} = 0.1$.

The height of formation of line center has then been determined as follows: given the grid of line center optical depths, which provides the optical depth along the vertical as a function of height from the atmosphere model, the height of formation of the line center is the one for which the optical depth along the line of sight is unity (Eddington-Barbier approximation), i.e. the one for which $\tau/\mu = 1$, where τ is the line center optical depth along the vertical, and μ is the cosine of the heliocentric angle θ. The heights obtained for each of the observed μ values are given in Table 1, in km above the $\tau_{5000} = 1$ level. The corresponding temperatures have been used to derive the value of the Doppler width $\Delta\nu_{\rm D}$, which also includes the microturbulent velocity (see Eq. (8)), and which is considered τ-independent in our model.

At this stage, it has to be stressed that a microturbulent velocity value of 1 km/s has been introduced in the present line opacity calculation. As this value is aimed to describe the microturbulence at all depths, we consider that it is not necessary to adjust it to the value derived at the line formation depth, that we determine further in the present work.

3.5. Atomic data

3.5.1. Radiative rates

The Einstein spontaneous emission coefficient has been taken from NIST (2003)

$$A_{21} = 2.01 \times 10^8 \, {\rm s}^{-1} \, , \tag{6}$$

leading to the oscillator strength value

$$f_{12} = 1.92 \, . \tag{7}$$

3.5.2. Elastic collisions: depolarizing rates

As already stated, the depolarizing effect due to elastic collisions (that induce depolarizing transitions between Zeeman sublevels) is mainly due to collisions with neutral hydrogen atoms. Since these collisions are isotropic, the corresponding rate for the density matrix element ρ^K_Q depends only on the multipolar order K, so that it is denoted as $D^{(K)}$ in Landi Degl'Innocenti et al. (1990, 1991), with $D^{(0)} = 0$.

A semi-classical method for computing the depolarizing rates has been derived from the formalism of Anstee & O'Mara (1991, 1995), and is presented in Derouich (2004) and Derouich et al. (2003) with results for atomic p states like the upper level of the Sr I 4607 Å line. The corresponding code has been used to compute the depolarizing rate $D^{(2)}$ at each optical depth, and the results are found in good agreement with those used by Faurobert et al. (1995, 2001), obtained by a quantum chemistry method.

3.5.3. Inelastic collisions: transfer rates

For the transfer rates due to inelastic collisions, that enter the ε' coefficient (see Eq. (4) for definition, and Landi Degl'Innocenti et al., 1990, 1991), the main contribution is the one due to electrons. We have used the semi-classical method of Seaton (1962) and Sahal-Bréchot (1969a, 1969b), completed with a model of momentum transfer during the collision (Bommier, to be published), to compute the excitation rates $C_{JJ'}$. The de-excitation rates $C_{J'J}$ have been derived by applying the mircoreversibility law. The semi-classical method is estimated to be accurate within 20%. It has been found in addition that the method of Van Regemorter (1962) used by Faurobert et al. (1995, 2001) gives results in good agreement with the present semi-classical ones.

3.6. Microturbulent and macroturbulent velocities

The microturbulent and macroturbulent velocities are generally introduced to take into account non-thermal motions. The microturbulent motions occur on scales that are small when compared to the photon mean free path, so that they constitute an additional source of line broadening besides the thermal broadening (collisional broadening has been neglected). The microturbulent velocity $v_{\rm micro}$ has then been introduced as usual in the Doppler width $\Delta\nu_{\rm D}$

$$\Delta\nu_{\rm D} = \frac{\nu_0}{c}\sqrt{\frac{2k_{\rm B}T}{M} + v^2_{\rm micro}} \, , \tag{8}$$

where ν_0 is the line center frequency, c the speed of light, $k_{\rm B}$ the Boltzmann constant, T the temperature at the height of line center formation (see the determination in Sect 3.4), and M the atomic weight taken from Allen (1973): 87.62 a.m.u. for strontium. The macroturbulent velocity corresponds to motions occuring on scales larger than the photon mean free path (Mihalas, 1978). They have been taken into account by means of a convolution of the theoretical emerging profiles in each Stokes parameter with a Gaussian of the form

$$\frac{1}{x\sqrt{\pi}} \exp\left\{ -\left(\frac{\nu - \nu_0}{x\Delta\nu_{\rm D}}\right)^2 \right\} \, , \tag{9}$$

where

$$x = \frac{v_{\rm macro}}{\sqrt{\frac{2k_{\rm B}T}{M} + v^2_{\rm micro}}} \, , \tag{10}$$

$v_{\rm macro}$ being the macroturbulent velocity (same approach as in Faurobert-Scholl et al., 2001).

4. Introduction of the instrumental parameters in the interpretation

These instrumental parameters are of various nature: instrumental profile and spectrograph non-zero slit width that introduces finite spectral resolution, diffraction limit of the telescope, scattered and stray light, ghost images in the spectrograph, etc... As it is simpler to model the effect under interest in the theoretical profile computation, we have introduced two effects in our theoretical model: the spectrograph slit width effect, which overpasses the diffraction limit, and the global effect of scattered, stray and ghost lights. These effects are taken into account in the theoretical profile to be compared to the observed one.

4.1. Instrumental profile and spectrograph slit width effect

The way to take into account the instrumental profile is to convolve the theoretical profile with a function that describes this instrumental effect. This function is not simply the instrumental profile itself, and a reasonable choice is to convolve the theoretical profile by the spectral cut of the entrance slit image on the camera. This spectral cut is a stepwise function, for which we have determined the spectral width of 19 mÅ for the 0.5 arcsec entrance slit that we have used on THEMIS. Adding this stepwise convolution to the theoretical profile computation, we have derived an increase of 1.0% of the Sr I 4607 Å line center intensity, resulting thus in a rather small effect.

4.2. Scattered, stray ans ghost light effect

The amplitude of this effect has been determined by comparing the observed profile at disk center (i.e., the mean profile of the flat field images that have been taken in the disk center vicinity), to an atlas profile (Delbouille et al., 1973). This has led us to the determination of a scattered, stray and ghost light level of 8.5% of the continuum intensity. In this determination, both observed and atlas profiles have been corrected at Sr I 4607 Å line center from the instrumental profile effect: the THEMIS profile as described above, and the atlas profile by taking into account the instrumental profile width of 6 mÅ as displayed by Delbouille et al. (1973), the effect of which being evaluated with our theoretical code as described above, resulting in a 0.10% increase of the Sr I 4607 Å line center intensity. This global parasitic light has been assumed to be unpolarized, and the corresponding rate of unpolarized intensity has been added to the computed intensity before comparison with observation. This effect represents the global effect of the light scattered in the telescope, in the transfer optics and in the spectrograph, of the stray light passing in the same regions, and of the ghost images. With the present rate of 8.5%, this correction is not negligible at all.

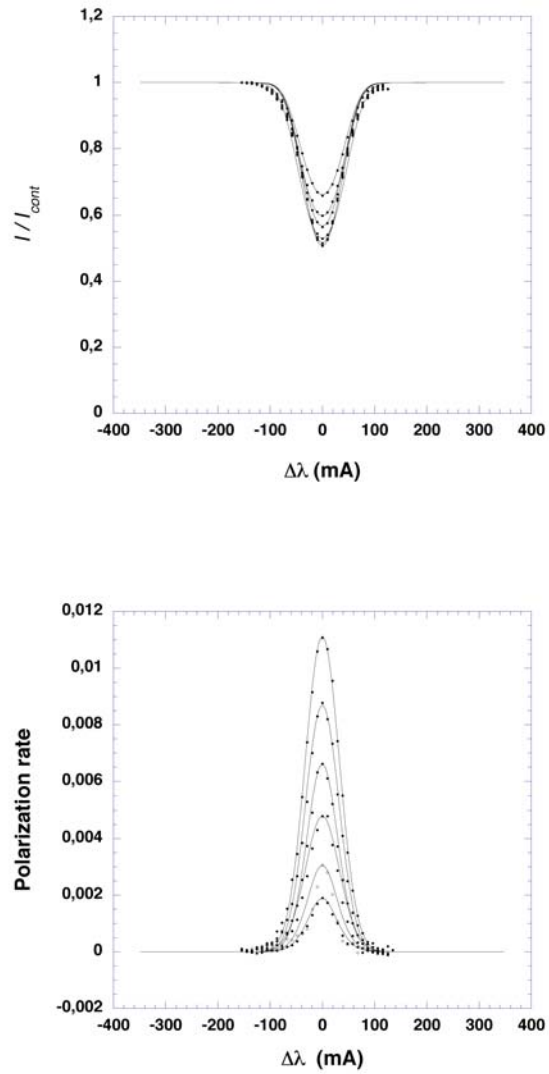

Fig. 2. Superposition of adjusted theoretical profiles (lines) and observations (dots) of 2002 December 7 and 9. The theoretical intensity profiles have been computed in a non-magnetized atmosphere and are used to determine $v_{\rm micro}$ and $v_{\rm macro}$. Given these values, the theoretical polarization profiles, adjusted to the observations at line center only, are used to determine the microturbulent field strength B from the magnetized atmosphere model.

5. Results and discussion

The results are displayed in Table 1, in terms of $v_{\rm micro}$ (km/s), $v_{\rm macro}$ (km/s), and B(Gauss). They have been obtained by comparing the theoretical profiles to the observed ones (the best fits are displayed in Fig. 2 for the data obtained on 2002 December 7 and 9). Within a good approximation, the relative intensity profile $I/I_{\rm cont}$ is independent of the magnetic field strength B, so that the

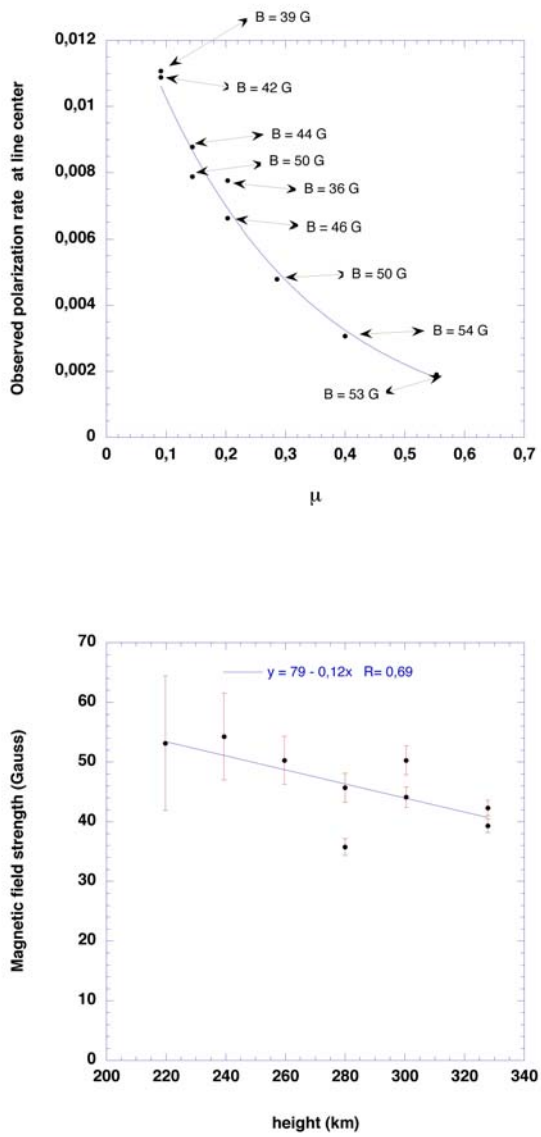

Fig. 3. Top: Center-to-limb variation of the observed linear polarization (dots), with exponential least square fit (line, see Eq. (11)), together with the values of the determined microturbulent field strength in Gauss. Bottom: microturbulent field strength in Gauss, as a function of the height above the $\tau_{5000} = 1$ level in km. This height results from our line opacity evaluation (see text). The error bars shox the effect of the polarimetric inaccuracy only, the theoretical data being assumed to be sure at this stage. The line is a least square fit, whose equation is provided.

velocities $v_{\rm micro}$ and $v_{\rm macro}$ have been firstly determined from the intensity profiles by applying a zero-field model, the magnetic field being determined in a second step from the polarization profile. The behavior of the theoretical intensity profile as a function of the velocities is as follows: the microturbulent velocity mainly determines the profile width, whereas the macroturbulent velocity mainly determines the profile height. The best fit is obtained by an iterative method which consists in first adjusting the profile width with $v_{\rm micro}$, then the profile height with $v_{\rm macro}$, and repeating the procedure until the difference between theoretical and observed profiles reaches its minimum. This yields a couple of values ($v_{\rm micro}$, $v_{\rm macro}$), which is thus uniquely determined. Using this couple of values, the turbulent magnetic field strength is determined by adjusting the line center theoretical polarization profile derived from the magnetized model, to the observed one (to which continuum polarization has been subtracted), without further adjustment of the polarization profile width. Fig. 3 displays the observed center-to-limb variation of the line polarization degree together with the derived magnetic field strengths. An exponential least square fit to the observations, given by the law

$$p = 0.01507 \exp(-3.84\mu) \ , \tag{11}$$

is also shown.

The resulting values for the three parameters $v_{\rm micro}$, $v_{\rm macro}$, and B are shown in Table 1. All three parameters do not show significant variations with μ, and their average values are the following ones:

$$\begin{aligned} v_{\rm micro} &= 1.87 \text{ km/s} \ , \\ v_{\rm macro} &= 1.78 \text{ km/s} \ , \\ B &= 46 \text{ Gauss} \ . \end{aligned} \tag{12}$$

The turbulent magnetic field strength ranges from 36 to 54 Gauss, and the standard deviation over the nine observed points is 6 Gauss for the magnetic field, and 0.15 and 0.13 km/s for the micorturbulent and macroturbulent velocities respectively. As it can be seen in Table 1, the velocities are found rather constant along the investigated depth. Also, $v_{\rm micro}$ and $v_{\rm macro}$ are found close together, indicating a weak dependence of the velocity strength on the velocity correlation length. As for the magnetic field strength, its variation with height is shown in the lower part of Fig. 3, where a trend for a decrease with height could eventually be assessed, with a gradient of -0.12 Gauss/km (as given by the linear least square fit, with a correlation coefficient $R = 0.69$), but the number of observed points is too low for a definite conclusion. Further observations with a higher number of points are needed. The error bars show the effect of the polarimetric inaccuracy only, the theoretical data being assumed to be sure at this stage. The polarimetric inaccuracy has been taken at the level of 2×10^{-4} in polarization rate, as it can be derived from Fig. 1 and from Bommier & Molodij (2002). The inaccuracy value in terms of magnetic field strength has been obtained by the derivation of Eq. (2), ignoring the collision effects at this stage.

The present magnetic field strengths are about twice the values of 20-30 Gauss derived by Faurobert et al. (2001) from their THEMIS observations. Faurobert et al. (2001) assume the values $v_{\rm micro} = 1$ km/s, about twice

lower, and $v_{\rm macro} = 2.5$ km/s, this last one being determined by adjustment of the theoretical intensity profile to the observed one. When we use Faurobert's values of $v_{\rm micro}$ and $v_{\rm macro}$, we derive turbulent field strength in the range 14-28 Gauss (average value 23 Gauss) from our model and our observations, in good agreement with the field strengths determined by Faurobert et al. (2001), which shows that both theoretical methods are in good agreement.

The value $v_{\rm micro} = 1$ km/s that has been used by Faurobert et al. (2001), has been taken from Fontenla et al. (1991). We have also used the atmosphere model of Fontenla et al. (1993), but let free this velocity value. At this stage, it has to be stressed that the microturbulent velocity value of Fontenla et al. (1991) is not a model result but is the result of a semi-empirical determination, and, as the authors point out, is of minor importance in their model, because it is used for introducing the turbulent pressure that does not play a very important role. This microturbulent velocity value is used a second time for the line opacity computation, but we have redone this calculation, introducing at this stage the microturbulent velocity value of 1 km/s for all depths (see Sect.3.4). Thus, due to this minor importance effect, we think that we can let the microturbulent velocity vary for a better line intensity fit.

We think that a proper adjustment of the theoretical profile to the observed one requires two free parameters, one mainly sensitive to the width and one mainly sensitive to the depth, as $v_{\rm micro}$ and $v_{\rm macro}$ are respectively. With only one free parameter, as done by Faurobert et al. (2001), the adjustment cannot be fully achieved.

As a result, the determination of the turbulent field strength is found to be strongly correlated to a proper fit of the intensity profile. This is the main conclusion of the present work.

Shchukina & Trujillo Bueno (2003) have considered the FAL-C model including its given height-dependent microturbulent velocity, and they have also concluded that, by varying only $v_{\rm macro}$, it is impossible to fit both line width and height. A difference by a factor 2 on the derived microturbulent field strength results, following the performed adjustment: the field strength is found about twice higher when the adjustment is performed on the line height. This confirms the main conclusion of the present work.

5.1. Effect of the accuracy of the depolarizing collision rates

Moreover, we have analyzed the effect of a possible inaccuracy of the depolarizing collision rates on the retrieved value of the turbulent magnetic field. We have found that, if the depolarizing rate $D^{(2)}$ is either multiplied or divided by a factor 2, the derived field strength is 30% lower or 20% higher respectively, so that the effect of the inaccuracy in the knowledge of the depolarizing rates on the magnetic field determination is relatively low. This is due to the fact that the Hanle effect is characterized by the factor

$$H = \frac{\omega_{\rm L}}{A + C + D^{(2)}} \,, \tag{13}$$

$\omega_{\rm L}$ being the Larmor pulsation, A being the Einstein coefficient for spontaneous de-excitation, and C being the collisional deexcitation probability. For a fixed H, we have, by differentiation

$$\frac{\delta\omega_{\rm L}}{\omega_{\rm L}} = \frac{\delta B}{B} = -\frac{D^{(2)}}{A + C + D^{(2)}} \frac{\delta D^{(2)}}{D^{(2)}} \,, \tag{14}$$

which explains our findings since $A \simeq D^{(2)}$ and $C \ll A$.

6. Conclusion

Similarly to previous authors, we conclude on the existence of a microturbulent magnetic field, evidenced by the fact that no rotation of the polarization direction with respect to the limb direction is observed (see Fig. 1), and by the fact that the observed polarization is considerably lower than what is expected from plane-parallel, realistic models of the solar atmosphere. The main criticism that can be made to these observations is that the spatial resolution is poor, because the data have been averaged along the slit which was one arcmin long. To increase the spatial resolution without decreasing too much the polarimetric sensitivity probably requires further instrumental progress.

The difference by a factor of 2 on the (assumed unimodal) turbulent field strength that we determine, and the one determined by Faurobert et al. (2001), has to be ascribed a difference in the fitting of the intensity profile. We think that two free parameters are necessary for a proper fit of this profile, one parameter being mainly sensitive to the line width and one being mainly sensitive to the line depth, as $v_{\rm micro}$ and $v_{\rm macro}$ are respectively. The other authors have taken $v_{\rm micro}$ from the values used in the atmosphere model (Fontenla et al., 1991, 1993). But the model authors claim that this microturbulent velocity is of minor importance in their model, so that we have let it vary for a better fit. From three observed quantities, which are the line width, height and center polarization, we thus derive three physical quantities.

A trend for a decrease of the turbulent magnetic field strength with height can eventually be assessed in the results, with a gradient of -0.12 Gauss/km, but the number of observed points (nine) is too low for a definite conclusion. Further observations with a higher number of points are needed.

It has to be stressed that the differences found in this work with respect to the work of Faurobert et al. have only to be ascribed to the way in which the two parameters $v_{\rm micro}$ and $v_{\rm macro}$ are handled: the radiative transfer formalisms employed are indeed different but equivalent in principle. The main hypotheses are the same as for the plane-parallel atmosphere, and nearly the same as for the ionization equilibrium of strontium that governs the line

absorption coefficient. Theoretical modelling of the Sr I 4607 Å line can be improved only by a full non-LTE treatment of the Sr II/Sr I ionization equilibrium (multi-level radiative transfer), and by applying multi-dimensional radiative transfer to magneto-convective simulations of the solar atmosphere, as done by Shchukina & Trujillo Bueno (2003) and Trujillo Bueno & Shchukina (to be published). These improvements are highly welcome since they will contribute to evaluate more realistically the polarization of the Sr I 4607 Å line without the need of introducing ad-hoc parameters such as $v_{\rm micro}$ and $v_{\rm macro}$. We think, however, that the results obtained in this paper on the value of the turbulent field will not be much affected by these more sophisticated investigations.

As for any Hanle magnetic field determination, the polarization rate in the absence of a magnetic field has to be evaluated, in order to retrieve the magnetic depolarization. In the present analysis, as in a lot of other ones, the zero-field polarization degree is derived from a theoretical model, whose accuracy is an essential factor of the field determination precision. So, the present determination can be qualified as a model-dependent one. Two kinds of model-independent techniques have been proposed besides, with promising objectives: the differential Hanle effect, where the magnetic field is derived from the ratio of two lines of different magnetic sensitivity (see analysis in Stenflo et al., 1998 , Berdyugina & Fluri, 2004). However, in this case, the model independence is rigorously obtained if the two lines are formed in the same conditions only. The second model-independent technique concerns lines showing far coherent wings that are insensitive to the magnetic field, contrarily to the line core. For the moment, such a feature has been found in one line only, namely Ca I 4227 Å. A technique of Hanle histograms based on this feature can be found in Bianda et al. (1998), but the field determination is statistical. In an analysis like the present one, the magnetic field strength is determined together with the height of formation of the line resulting from the model, bringing thus some information on the height dependence of the field strength, which is of high interest for the solar atmosphere knowledge.

Acknowledgements. The authors are indebted to M. Faurobert, for clarifying advices in particular on the macroturbulent velocity effect.

References

Allen, C.W. 1973, Astrophysical Quantities, 3rd Edition, Univ. of London, the Athlone Press.
Anstee, S.D., & O'Mara, B.J. 1991, MNRAS, 253, 549
Anstee, S.D., & O'Mara, B.J. 1995, MNRAS, 276, 859
Berdyugina, S.V., & Fluri, D.M. 2004, A&A, 417, 775
Bianda, M., Solanki, S.K., & Stenflo, J.O. 1998, A&A, 331, 760
Bommier, V., & Landi Degl'Innocenti, E. 1998, in C. Briand (ed.), THEMIS International Workshop on Radiative Transfer and Inversion Codes, Tenerife (Spain), 1998 February 9-11, Paris Observatory Publ., 17
Bommier, V., & Molodij, G. 2002, A&A, 381, 241
Bommier, V., & Rayrole, J. 2002, A&A, 381, 227
Bommier, V., Landi Degl'Innocenti, E., & Sahal-Bréchot, S. 1991, A&A, 244, 383
Delbouille, L., Roland, G., & Neuven, L. 1973, Photometric atlas of the solar spectrum from 3000 Å to 10000 Å, Institut d'Astrophysique, Liège University (Belgium)
Derouich, M. 2004, Thèse de doctorat, Université Paris VII Denis Diderot (France)
Derouich, M., Sahal-Bréchot, S., Barklem, P.S., & O'Mara, B.J. 2003, A&A, 404, 763
Faurobert-Scholl, M. 1991, A&A, 246, 469
Faurobert-Scholl, M. 1993, A&A, 268, 765
Faurobert-Scholl, M., & Frisch, H., 1989 A&A, 219, 338
Faurobert-Scholl, M., Feautrier, N., Machefert, F., Petrovay, K., & Spielfiedel, A. 1995, A&A, 298, 289
Faurobert, M., Arnaud, J., Vigneau, J., & Frisch, H. 2001, A&A, 378, 627
Frisch, H. 1998, A&A, 338, 683
Fluri, D., & Stenflo, J.O., 1999 A&A, 341, 902
Fontenla, J.M., Avrett, E.H., & Loeser, R. 1991, ApJ, 377, 712
Fontenla, J.M., Avrett, E.H., & Loeser, R. 1993, ApJ, 406, 319
Gandorfer, A. 2000, The Second Solar Spectrum. A high spectral resolution polarimetric survey of scattering polarization at the solar limb in graphical representation. Volume I: 4625 Å to 6995 Å. Hochschulverlag AG an der ETH Zürich
Gandorfer, A. 2002, The Second Solar Spectrum. A high spectral resolution polarimetric survey of scattering polarization at the solar limb in graphical representation. Volume II: 3910 Å to 4630 Å. Hochschulverlag AG an der ETH Zürich
Landi Degl'Innocenti, E. 1976, A&AS, 25, 379
Landi Degl'Innocenti, E., & Bommier, V. 1994, A&A, 284, 865
Landi Degl'Innocenti, E., Bommier, V., & Sahal-Bréchot, S. 1990, A&A, 235, 459
Landi Degl'Innocenti, E., Bommier, V., & Sahal-Bréchot, S. 1991, A&A, 244, 391
Maltby, P., Avrett, E.H., Carlsson, M., Kjeldseth-Moe, O., Kurucz, R.L., & Loeser, R. 1986, ApJ, 306, 284
Mihalas, D. 1978, Stellar Atmospheres (2nd edition). Freeman, San Francisco
NIST 2003, http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main_asd
Rees, D.E. 1978, Publ. Astron. Soc. Jpn., 30, 455
Sahal-Bréchot, S. 1969a, A&A, 1, 91
Sahal-Bréchot, S. 1969b, A&A, 2, 322
Seaton, M.J. 1962, Proc. Phys. Soc., 79, n ° 512, 1105
Semel, M. 2003, A&A, 401, 1, and private communication
Shchukina, N., Trujillo Bueno, J., in Solar Polarization 3, Porceedings of the meeting held in Tenerife, 2002 September 30-October 4, J. Trujillo Bueno & J. Sánchez Almeida (eds.), ASP Conf. Ser. 307, 336
Stenflo, J.O. 1982, Solar Phys. 80, 209
Stenflo, J.O. 2002, in Astrophysical Spectropolarimetry, Proceedings of the XII Canary islands Winter School of Astrophysics, Puerto de la Cruz, Tenerife, Spain, November 13-24, 2000. J. Trujillo Bueno, F. Moreno-Insertis & F. Sánchez (eds.), Cambridge University Press, p. 55
Stenflo, J.O., Twerenbold, D., & Harvey, J.W. 1983a, A&AS, 52, 161
Stenflo, J.O., Twerenbold, D., Harvey, J.W., & Brault, J.W. 1983b, A&AS, 54, 505
Stenflo, J.O., Bianda, M., Keller, C.U., & Solanki, S.K. 1997, A&A, 322, 985

Stenflo, J.O., Keller, C.U., & Gandorfer, A. 1998, A&A, 329, 319
Trujillo Bueno, J., Manso Sainz, R. 1999, ApJ, 516, 436
Trujillo Bueno, J., Collados, M., Paletou, F., & Molodij, G. 2001, in: Advanced Solar Polarimetry, Proc. 20th NSO/Sac Peak Summer Workshop. M. Sigwarth (ed.), ASP Conf. Ser. 236, 141
Van Regemorter, H. 1962, ApJ, 136, 906

Bibliographie

- Ackermann H., 1966, Colloques Internationaux du CNRS (Paris, France: editions du CNRS), N° 164, 82
- Aller L.H., 1963, Astrophysics: The atmospheres of the Sun and stars. The Roland Press, New York
- Anstee S.D., & O'Mara B.J., 1991, MNRAS, 253, 549
- Allard N. & Kielkopf J., neutral nonresonant collisions on atomic spectral lines. Oct. 1982, Rev. Mod. Phys. (USA), 54, 1103
- Anstee S.D. PhD thesis, Univ. Queensland, 1992
- Anstee S.D., & O'Mara B.J., 1995, MNRAS, 276, 859
- Anstee S.D., O'Mara B.J., & Ross J.E., 1997, MNRAS, 284, 202
- Barklem P.S., & O'Mara B.J., 1997, MNRAS, 290, 102
- Barklem P.S., & O'Mara B.J., & Ross J.E., 1998a, MNRAS, 296, 1057
- Barklem P.S. PhD thesis , Univ. Queensland, 1998b
- Barklem P.S, Anstee S.D., O'Mara B.J., 1998c, PASA 15(3), 336.
- Barklem P.S., & O'Mara B.J., 1998d, MNRAS, 300, 863
- Barklem, P. S., Piskunov, N. & O'Mara, B. J., 2000a, A&A Supp., 142, 467
- Barklem P.S., & O'Mara B.J., 2000b, MNRAS, 311, 535
- Barklem P.S., Piskunov N., & O'Mara B.J., 2000c, A&A, 142, 467
- Bianda, M., Stenflo, J. O., & Solanki, S. K. 1998, A&A, 337, 565
- Bommier V., Thèse de troisième cycle, Université Paris VI, Paris-France
- Bommier V., & Sahal-Bréchot S., 1978, A&A, 69, 57
- Bommier V., 1980, A&A, 87, 109
- Bommier V., Sahal-Brechot S., & Leroy J. L., A&A, 100, 231
- Bommier V., & Sahal-Bréchot S., 1982, Solar Physics, 78, 157
- Bommier V., Landi Degl'Innocenti E., & Sahal-Bréchot S., Second Atelier "Transfert de Rayonnement", Paris, 9-10 février 1989, H. Frisch & N. Mein (eds), Publication de l'Observatoire de Paris
- Bommier V., Landi Degl'Innocenti E., & Sahal-Bréchot S., 1991, A&A, 244, 383
- Bommier V., & Molodij G., 2002, A&A, 381, 241
- Bommier V., Derouich M., Landi Degl'Innocenti E., Molodij G., & Sahal-Bréchot S., 2003, soumis dans A&A
- Born M., & Wolf E., 1959, Principles of Optics, Pergamon Press
- Bransden B.H. & Joachain C.J., 1983, Physics of Atoms and Molecules (Published in the Unated States of America by Longman Inc., New York)
- rink D.M. & G.R. Satchler, Angular Momentum, Oxford University Press, 1962
- Brückner, G.: 1963, Z. Astrophys. 58, 73
- Brueckner K.A., 1971, ApJ, 169, 621

- Trujillo Bueno J., 20th International Sacramento Peak Summer Workshop, 11-15 September 2000, ASPConferences series, 2001, 236, 161
- Trujillo Bueno J.,
- Carter W.W., 1949, Phy. Rev., 76, 962
- Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, & Franck Laloë, 1973, Mécanique Quantique Tome I, Hermann.
- Dalgarno A. & Williams D.A., 1962, Proc. Phy. Soc. (London), A69, 57
- Dalgarno A., 1962, Adv. Phys., 11, 281
- Dalgarno A., Geophys. Corp. Am. Tech. Rep., n 62-28-A
- Dalgarno A. & Williams D.A., 1962, ApJ, 136, 690
- Derouich M., Sahal-Bréchot S., Barklem P.S., & O'Mara B.J., 2003a, A&A, 404, 763
- Derouich M., Sahal-Bréchot S., Barklem P.S., 2003b, A&A, 409, 369
- Derouich M., Sahal-Bréchot S., Barklem P.S., 2003c, accepted in A&A
- Dittmann, O., Trujillo Bueno, J., Semel, M., & López Ariste, A. 2001, in Advanced Solar Polarimetry: Theory, Observation, and Instrumentation, ed. M. Sigwarth, ASP Conf. Ser., 236, 125
- An investigation of the collisional broadening of Spectral lines. PhD thesis, Univ. Queensland, 1973
- Edmonds A.R., Angular momentum in Quantum mechanics. Princeton University Press, Princeton, Neww Jersey, 1960.
- Fano U., & Racah G., 1959, Irreducible Tensorial Sets (New York; Academic Press)
- Faurobert M., 1993, A&A, 268, 765
- Faurobert M., Arnaud J., Vigneau J., & Frisch H., 2001, A&A 378, 627
- Gandorfer A., 2000, The Second Solar Spectrum: A high spectral resolution polarimetric survey of scattering polarization at the solar limb in graphical representation, vol. 1: 4625 Å to 6995 Å (Hochschulverlag AG an der ETH Zurich)
- Gandorfer A., 2002, The Second Solar Spectrum: A high spectral resolution polarimetric survey of scattering polarization at the solar limb in graphical representation, vol. 2: 3910 Å to 4630 Å (Hochschulverlag AG an der ETH Zurich)
- Gangrsky Yu.P., Karaivanov D.V., Marinova K.P., Markov B.N., Melnikova L.M., Mishinsky G.V., Zemlyanoi S.G., & Zhemenik V.I., 1998, Eur. Phys. J. A, 3, 313
- Goodisman J., 1973, Diatomic Interaction Potential Theory (New York; Academic Press)
- Fano U., 1963, Phys. Rev., 131, 259
- Gangrsky Yu.P., Karaivanov D.V., Marinova K.P., Markov B.N., Melnikova L.M., Mishinsky G.V., Zemlyanoi S.G., & Zhemenik V.I., 1998, Eur. Phys. J. A, 3, 313
- Gaupp A., Kuske P., & Andra H.J., 1982, Phys. Rev., A26, 3351
- Gingerich, O. J.; Latham, D. W.; Linsky, J. L.; Kumar, S. S., 1967, Smithsonian Astrophys. Obs. Special Report, n 240, Cambridge Mass
- Gordeyev E.P., Nikitin E.E., & Ovchinnikova M. Ya., 1969, Can. J. Phys., 47, 1819
- Goodisman J., 1973, Diatomic Interaction Potential Theory, Academic, New York
- Hanle W., Naturwissenschaften, 11, 690
- Hanle W., Z. Phys., 30, 93

- Ivanov, V. V. 1991, in ed. L. Crivellari, I. Hubeny, & D. G. Hummer, Stellar Atmospheres: Beyond Classical Models, Proc. NATO (Kluwer, Dordrecht), 81
- First Solar Polarization Workshop, St Petersburg, Russia, 8-12 May 1995
- Jäger, F.W., 1954, Z. Astrophys. 34, 237
- Jäger, F.W., 1957, Z. Astrophys. 43, 98
- Kerkeni B., Spielfiedel A., & Feautrier N., 2000, A&A, 358, 373
- Kerkeni B., 2002a, A&A, 390, 791
- Kerkeni B., & Bommier V., 2002b, A&A, 394, 707
- Kerkeni B., Spielfiedel A., & Feautrier N., 2003, A&A, 402, 5
- Lamb F.K. & D. ter Haar, 1971, Phys. Rep., 2C(4), 253
- Landau L. D. & Lifchitz E.M., 1969, Mécanique Quantique, Editions Mir, Moscou
- Landi Degl'Innocenti E., 1976, A&A, 25, 379
- Landi Degl'Innocenti E., 1983, Solar Physics, 85, 3
- Landi Degl'Innocenti E., 1984, Solar Physics, 91, 1
- Landi Degl'Innocenti E., 1985, Solar Physics, 102, 1
- N. Shchukina & J. Trujillo Bueno "Resonance polarization in molecular lines" in "Solar polarization 3", J. Trujillo Bueno and J. Sanchez Almeida (eds.), ASP Conference Series, 307, 2003.
- Landau L.D., & Lifshitz E.M., 1967, Quantum Mechanics: Non relativistic Theory, Permangon Press, second edition
- Landi Degl'Innocenti E., Bommier V., & Sahal-Bréchot S., 1990, A&A, 235, 459
- Leroy J.L., 1972, A&A 19, 287
- Title unknown. PhD thesis, Uppsala University, Uppsala, Sweden, 1942
- Maltby P., Avrett E. H., Carlsson M., Kjeldseth-Moe O., Kurucz R. L., Loeser R., 1986, ApJ, 306, 284
- Manso Sainz R., & Trujillo Bueno, J. 2001, in Advanced Solar Polarimetry: Theory, Observation, and Instrumentation, ed. M. Sigwarth, ASP Conf. Ser., 236, 213
- Manso Sainz R., & Landi Degl'Innocenti E., 2002, A&A, 394, 1093
- Manso Sainz R., Trujillo Bueno, J. 2003, Phys. Rev. Letters, 91, 11
- Masnou-Seeuws F., & Roueff E., 1972, Chem. Phys. L., 16, 593
- Messiah A., 1961, Mécanique Quantique (Paris: Dunod)
- Mitchell A.C.G. & Zemansky M.W., 1934, Resonance radiation and excited atoms, Cambridge university press NIST 2003, http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main$_{\rm asd}$
- NIST, http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main_asd
- O'Mara B.J., 1976, MNRAS, 177, 551
- Omont A., 1977, Prog. Quan. Elec., 5, 69
- Povel, H.P.: 1995, Optical Engineering 34, 1870
- Querfeld, C. W., in Stenflo J.O. (ed), Rep. Observatory Lund, 12, 109
- Redman, R.C.: 1941, M.N.R.A.S. 101, 266
- Van Regemorter H., 1962, ApJ, 136, 906
- Roueff E., PhD thesis, Univ. Paris VII, 1972

- Roueff E., 1974a, J.Phys. B, 7, 185
- Roueff E., & Suzor A., 1974b, J.Phys. B, 35, 727
- Sahal-Bréchot S., 1969a, A&A, 1, 91
- Sahal-Bréchot S., 1969a, A&A, 2, 322
- Sahal-Bréchot S., 1973, A&A, 32, 147
- Sahal-Bréchot S., 1977a, ApJ., 213, 887
- Sahal-Bréchot S., Bommier V, & Leroy, J.L., 1977b, A&A., 59, 223
- Sahal-Bréchot S.,Malinovsky M. ,& Bommier V , 1986, A&A., 168, 284
- Sahal-Bréchot S., E. Vogt, S. Thoraval, & I. Diedhiou, 1996, A&A., 309, 317
- Seaton M.J., 1958, MNRAS, 118, 504
- Seaton M.J., 1962, Proc. Phys. Soc., 79, n 512, 1105
- E.W.Smith, C.R.Vidal, & J.Cooper, J. Classical path methods in line broadening, I. Classical path approximation. 1969, J.Res.NBS, 389, 73A(4)
- Stenflo, J.O., Baur, T.G., Elmore, D.F., 1980, A&A 84, 60
- Stenflo, J.O., 1982, Solar Phys., 80, 209.
- Stenflo, J.O., Twerenbold, D., Harvey, J.W., 1983a, A&AS 52, 161 NASA ADS
- Stenflo, J.O., Twerenbold, D., Harvey, J.W., Brault, J.W., 1983b, A&AS 54, 505
- Stenflo, J.O., & Keller, C.U., 1996, Nature 382, 588
- Stenflo J.O., & Keller C.U., 1997, A&A, 321, 927
- Stenflo, J. O., Keller, C., & Gandorfer, A. 2000, A&A, 355, 789
- Stenflo J.O., 2001, in Advanced Solar Polarimetry: Theory, Observation, and Instrumentation, ed. M. Sigwarth (San Francisco: Astronomical Society of the Pacific), ASP Conf. Ser., 236, 97
- Suzor A., PhD thesis, Univ. Paris, 1973
- Theodosiou C. E. 1989, Phys.l Rev. A, 39, 4880
- Trujillo Bueno J., 2001, in Advanced Solar Polarimetry: Theory, Observation, and Instrumentation, ed. M. Sigwarth (San Francisco: Astronomical Society of the Pacific), ASP Conf. Ser., 236, 97
- Trujillo Bueno, J., & Manso Sainz, R. 2001, in Magnetic Fields Across the Hertzsprung-Russell Diagram, ed. G. Mathys, S. K. Solanki, & D. T. Wickramasinghe (San Francisco: Astronomical Society of the Pacific), ASP Conf. Ser., 248, 83
- Trujillo Bueno, J., & Manso Sainz, R.: 2002, "Remote Sensing of Chromospheric Magnetic Fields via the Hanle and Zeeman Effects", Il Nuovo Cimento, 25 C, 783
- L. Talmi, Simple Models of Complex Nuclei The Shell Model and Interacting Boson Model Contemporary Concepts in Physics Vol 7, Harwood Academic Publishers, New York, 1993.
- Unsöld A.L., 1927, Zeitschrit für Physik, 43, 574
- Unsöld A.L., 1955, Physik der Stern Atmosphären (Zweite Auflage)
- Warner B., Atomic oscillator strengths, MNRAS, 139, 1, 1968
- Weyl H., Classical Groups, Princeton University Press, 1939
- Wiehr, E., 1975, A&A 38, 303
- Wiehr, E., 1978, A&A 67, 257

- Wiehr, E., 1981, A&A 95, 54
- Wiese W. L., Smith M. W., Glennon B. M., 1966, Atomic Transition Probabilities - Hydrogen through Neon. U.S. Dept. of Commerce, National Bureau of Standards
- Wiese W. L., Smith M. W., & Miles B. M., 1969, Atomic Transition Probabilities - Sodium through Calcium. U. S. Dept. of Commerce, National Bureau of Standards, Washington