

THÈSE présentée
pour l'obtention
du
DIPLÔME de DOCTEUR de 3^e CYCLE
à
L'UNIVERSITÉ PIERRE et MARIE CURIE
. Paris 6 .

spécialité : PHYSIQUE ATOMIQUE ET MOLECULAIRE

mention :

par M on sieur Patrice CACCIANI

Sujet de la thèse :

CONTRIBUTION à l'ETUDE du SPECTRE de PHOTOIONISATION
de l'ATOME de LITHIUM en PRESENCE d'un CHAMP MAGNETIQUE
INTENSE.

soutenu le 4 Mai 1984

devant la commission composée de :

MM.	J. -P. BRIAND	Président
	J. -C. GAY	Examineur
	S. LIBERMAN	"
Mme	E. LUC-KOENIG	"
M.	J. PINARD	"

TABLE DES MATIERES

<u>INTRODUCTION</u>	1
Chapitre I : <u>POSITION DU PROBLEME</u>	9
I - <u>Les forces en présence</u>	10
II - <u>La séparabilité de l'Hamiltonien</u>	14
1. Propriétés de symétrie et séparabilité	14
2. Les symétries particulières de l'atome d'Hydrogène	21
3. L'atome d'Hydrogène en champ électrique	22
4. L'atome d'Hydrogène en champ magnétique	25
Chapitre II : <u>MODELES THEORIQUES - ATOME</u> <u>d'HYDROGENE SOUMIS à un CHAMP MAGNETIQUE</u> <u>UNIFORME</u>	31
I - <u>Modèles classiques</u>	32
1. Description classique à l'aide de potentiels :	
A - Référentiel de Larmor	32
B - Etude du potentiel V	33
2. Description classique Lagrangienne et Hamiltonienne	38
A - Lagrangien, Hamiltonien	38
B - Choix de la jauge cylindrique	38
3. Modèle semi-classique. Quantification de l'action	39

II - <u>Approche quantique</u>	45
1. Deux cas extrêmes résolus :	
A - Atome hydrogénoïde : électron soumis au potentiel coulombien	45
α - Hamiltonien	45
β - Résolution	46
γ - La représentation (\vec{J}_1, \vec{J}_2)	48
B - Les niveaux de Landau	51
α - Hamiltonien	51
β - Résolution	51
2. L'Hamiltonien à deux corps. Réduction du centre de masse	52
3. L'Hamiltonien réduit	57
A - Le champ électrique motionnel	57
B - Symétrie et constantes de mouvement	58
C - Règle de sélection pour les probabilités de transition dipolaire électrique à un photon	60
D - Effets relativistes	61
E - Conclusion	62
III - <u>Les états très excités des atomes en présence d'un champ magnétique intense</u>	65
1. Zone diamagnétique	66
A - Etude de l'effet doamagnétique à l'intérieur d'un multiplet n fixé	67
α - Atome d'Hydrogène	68
β - Les atomes alcalins	71
B - Etude de l'effet diamagnétique lorsque H_D couple les états de n différents ..	75
α - Atome d'Hydrogène	75
β - Atome Alcalins	77
C - Une symétrie dynamique approchée en champ faible	77
α - Approche classique	78

β - Approche quantique	80
γ - Conséquences liées à l'existence d'un invariant : mouvement de l'électron en présence de la perturbation diamagnétique	82
2. Zone de quasi-Landau (ou zone intermédiaire) ...	86
A - Modèle semi-classique	87
B - Lois d'échelle	92
3. Zone de champ très intense. Sous-structure des résonances de quasi-Landau	94
 Chapitre III : <u>MONTAGE EXPERIMENTAL</u>	 99
I - <u>Expériences antérieures</u>	99
II - <u>Justification de notre choix</u>	103
1. Le Lithium	103
2. Excitation	105
3. Détection	107
4. Le champ magnétique	107
III - <u>Description détaillée du dispositif expérimental</u> ..	108
1. Le jet atomique	108
A - Le pompage	108
B - Production du jet atomique	110
C - Zone d'interaction	111
2. Le détecteur et le traitement du signal	114
A - Le détecteur	114
B - Une difficulté expérimentale : l'effet Pening	116
C - Le traitement du signal	118
3. L'aimant supraconducteur	122
A - Description générale	122
B - Le matériau supraconducteur	123
C - Circuit électrique	124
α - Cablage interne	
β - Cablage externe	

IV

D - Mise en froid et en champ magnétique	126
α - Mise en froid	126
β - Mise en champ magnétique	127
E - Conclusion	129
4. Le système laser	129
A - Principe du système	130
α - Injection	130
β - Une seule cavité à double excitation séparée	130
B - Description du système	133
α - La cavité	133
β - Le système amplificateur	138
γ - Doublage et mélange de fréquences	138
C - Un système haute résolution	141
IV - <u>Mesures</u>	142
1. Champ magnétique	142
2. Energie	143
Chapitre IV : <u>RESULTATS EXPERIMENTAUX.</u>	
<u>Introduction</u>	145
I - <u>Zone diamagnétique</u>	149
1. Spectres en polarisation σ , les états	
M=+1 et M=-1	149
A - Les multiplets diamagnétiques	150
α - Description	150
β - Diagramme d'énergie	150
γ - Interprétation théorique	157
B - Les anticroisements	163
α - Observation	163
β - Interprétation : effet non hydro- généofides et largeurs des anti- croisements	168
2. Spectres en polarisation π , les états M=0 ..	178
A - Les multiplets diamagnétiques	178

α - Description	178
β - Diagramme d'énergie	180
γ - Interprétation théorique	185
B - Les anticroisements	187
α - Observation	187
β - Interprétation	189
3. Structure des multiplets et symétrie	
approchée en champ faible	189
II - <u>Vers les états de quasi-Landau</u>	194
1. Expériences à $B = 3,89$ T	195
A - Méthodes expérimentales	195
B - Résultats	195
C - Interprétation	195
2. Expériences à $B = 4,86$ T	204
III - <u>Seuils de photoionisation</u>	205
1. Expérience en polarisation π	205
2. Interprétation	208
3. Derniers résultats : seuil en polarisation σ ..	210
 <u>CONCLUSION</u>	 213
 <u>REFERENCES</u>	 219

Notations et constantes

- Grandeurs de la mécanique classique : particule de charge q soumise à un potentiel vecteur \vec{A}_e ou à un potentiel scalaire V .

\vec{r} rayon vecteur.

$\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt}$ vitesse.

$\vec{\gamma} = \frac{d^2\vec{r}}{dt^2}$ accélération.

\vec{p} impulsion.

$\vec{\pi} = m\vec{v} = \vec{p} - q \vec{A}_e$ quantité de mouvement.

$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ moment cinétique.

$\vec{\lambda} = \vec{r} \times \vec{\pi}$ moment de la quantité de mouvement.

$\vec{a} = \frac{\vec{p} \times \vec{l}}{m} - Ze^2 \frac{\vec{r}}{r^3}$ vecteur de Runge Lenz, associé au problème de Kepler non relativiste force $\vec{F} = -Ze^2 \frac{\vec{r}}{r^3}$.

\mathcal{L} Lagrangien.

\mathcal{H} Hamiltonien.

- Grandeurs correspondantes de la mécanique quantique

\vec{R} rayon vecteur \vec{r}

\vec{P} impulsion \vec{p}

$\vec{\Pi}$ quantité de mouvement

\vec{L} moment cinétique l

L_z composant z du moment cinétique M

\vec{A} vecteur de Runge Lenz

H Hamiltonien E

Π_t	transformation d'inversion $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$
Π_z	transformation de réflexion par rapport au plan $z = 0$

Les fonctions d'ondes seront souvent écrites en représentation \vec{r} et le principe de correspondance associera à l'opérateur \vec{P} , un opérateur différentiel dans cette représentation.

- Unités et constantes.

. Système international.

h constante de Planck	$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054589(6) \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
m masse de l'électron	$9,10953(5) \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
c vitesse de la lumière	$2,99792458(1) \cdot 10^8 \text{ m/s}$
q charge de l'électron	$-1,602189(5) \cdot 10^{-19} \text{ C}$

On notera pour plus de simplicité

$$e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \quad \text{constante de structure fine} \quad 1/137,0360(1)$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} \quad \text{rayon de Bohr} \quad 0,5291771 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

. Unités usuelles.

E_I énergie d'ionisation de l'hydrogène sans effet d'entraînement

$$\text{du noyau} = 13,60580 \text{ eV} \quad \text{et} \quad E_I = \frac{m e^4}{2 \hbar^2}$$

R_∞ constante de Rydberg $109737,318(8) \text{ cm}^{-1}$

$$R_\infty = E_I / hc$$

On rappelle les correspondances en énergie. Un électron volt correspond à :

- . une fréquence $\nu = 2,41796 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$ par la relation $E = h\nu$
- . une longueur d'onde $\lambda = 12398,53 \text{ nm}$ par la relation $\lambda = \frac{c}{\nu}$
- . un nombre d'ondes $\sigma = 8065,475 \text{ cm}^{-1}$ par $\sigma = \frac{1}{\lambda}$.

. Unités atomiques

a_0 est l'unité de longueur

$2 E_I$ est l'unité d'énergie appelée Hartree.

Dans les formules on pourra substituer :

$$e^2 = 1, \quad m = 1, \quad \hbar = 1.$$

- Grandeurs dépendant du champ magnétique.

L'axe du champ magnétique sera toujours dirigé suivant Oz .

On notera :

$$\begin{aligned} \omega_c &= -\frac{q B}{m} && \text{pulsation cyclotron } 0,93372 \text{ cm}^{-1} \text{ pour } 1 \text{ T} \\ & && 27,9921 \text{ GHz pour } 1 \text{ T} \\ a_c &= \sqrt{\frac{\hbar}{-qB}} && \text{rayon cyclotron } 256,56 \text{ nm à } 1 \text{ T} . \\ & && 484,82 \text{ u.a. à } 1 \text{ T} \end{aligned}$$

L'unité de champ magnétique est bien sur le Tesla, mais on utilisera aussi le terme $\gamma = B/B_c$ où B_c est donné par :

$$B_c = \frac{-m^2 q^3}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3} = \frac{-m^2 e^4}{q \hbar^3} = 2,35053 \cdot 10^5 \text{ T}$$

B_c est la valeur du champ magnétique pour laquelle $\hbar\omega_c = 2 E_I$.

Par conséquent : $\gamma = \frac{B}{B_c} = \frac{\hbar\omega_c}{2 E_I}$.

INTRODUCTION

De façon tout à fait générale, il est très difficile sinon impossible d'étudier un atome isolé sans considérer l'environnement plus ou moins perturbateur auquel il est soumis. Celui-ci peut être de nature très variée, mais crée essentiellement en première approximation des champs électrique, magnétique ou électromagnétique.

C'est ce qui se passe lorsque l'atome est soumis aux champs créés par la proximité d'autres atomes, aux champs associés aux fluctuations du vide, aux champs d'une radiation électromagnétique, etc...

C'est dans ce cadre très général que se place l'étude du comportement de l'atome en présence d'un champ électrique ou magnétique statique.

Au-delà de notre univers terrestre, en astrophysique, ces types de champs peuvent être si intenses qu'ils modifient profondément les propriétés des systèmes atomiques ; cependant ces comportements nouveaux sont très difficiles à prévoir. En effet, le régime des champs très intenses est inaccessible pour des expériences de laboratoire portant sur des atomes peu excités. Du point de vue théorique, si les équations du système atome-champ peuvent être bien établies, elles ne peuvent souvent être résolues que de façon très approchée. Alors, l'expérience et elle seule, imaginée dans des conditions bien précises permet d'apporter les éléments d'informations qui conduisent progressivement à la compréhension puis à la résolution du problème posé.

Ce type d'études a évolué avec une très grande rapidité depuis l'apparition des lasers à longueur d'onde variable permettant une excitation

efficace et sélective de l'atome vers des états de Rydberg, c'est-à-dire des états pour lesquels l'énergie de liaison de l'électron avec le noyau est faible. En effet, les atomes dans des états si excités sont particulièrement sensibles aux champs extérieurs même si ces champs ont une intensité faible, l'énergie liée à la présence de ces champs étant du même ordre de grandeur que l'énergie électrostatique de liaison de l'atome. Ceci offre au physicien atomiste la possibilité de simuler des systèmes atomiques soumis à des "champs très intenses".

C'est ainsi que d'importantes études expérimentales ont été effectuées sur les atomes de Rydberg en présence de champ électrique (voir les références [27] et [107] ainsi que les références contenues dans ces deux papiers). L'interprétation des résultats obtenus a été facilitée par l'existence d'une théorie non relativiste exacte de l'atome d'hydrogène en présence de champ électrique [108-112]. Grâce à cette solide base théorique et aux nombreuses expériences, un certain nombre de phénomènes découverts récemment sont maintenant bien compris. L'étude approfondie des phénomènes d'ionisation a même permis l'élaboration d'une méthode de détection expérimental très efficace des états de Rydberg : la méthode d'ionisation par champ électrique [113].

En champ magnétique, plusieurs difficultés apparaissent. Tout d'abord, l'hamiltonien d'interaction entre l'atome et le champ comprend deux termes :

- le terme paramagnétique, linéaire en champ,
- le terme diamagnétique quadratique en champ.

Pour les champs que l'on peut produire en laboratoire, ce terme est négligeable pour des états peu excités mais joue un rôle déterminant dans l'étude des états de Rydberg. Le comportement de l'atome dépend donc très fortement de l'importance de ces deux termes, et est fonction par conséquent non seulement de l'intensité du champ mais aussi du degré d'excitation de l'atome étudié. D'autre part, une résolution quantique non relativiste exacte du problème le plus simple, l'atome d'hydrogène en champ magnétique, n'a pu être trouvée. Une solide base théorique fait défaut dans ce cas.

D'un point de vue expérimental, les champs magnétiques intenses que l'on peut obtenir en laboratoire dépassent rarement une dizaine de Teslas. D'autre part, pour de telles intensités des champs, l'environnement magnétique nécessite une technologie adaptée. En particulier, la détection des particules chargées devient très délicate.

Pour toutes ces raisons, l'étude de l'atome en présence d'un champ magnétique n'a été que partiellement entreprise. Nous allons en rappeler les principales étapes historiques, en renvoyant pour plus de détails à l'article de revue [12].

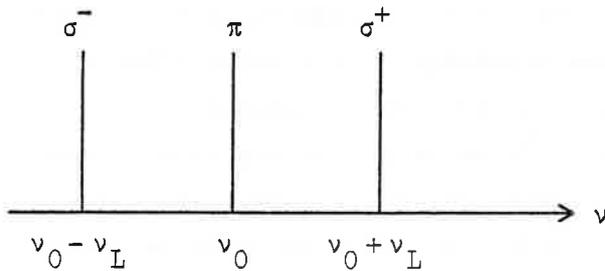
Le premier phénomène physique fut observé par Zeeman en 1896. Il s'agit de la décomposition des raies de fluorescence de spectres simples sous l'effet d'un champ magnétique peu intense. Ces raies spectrales correspondent aux transitions entre les niveaux peu excités de l'atome. Le terme paramagnétique faible devant le potentiel coulombien lève la dégénérescence suivant le nombre quantique magnétique des niveaux d'énergie, ce qui permet d'expliquer la séparation en plusieurs composantes des raies spectrales et de rendre compte de la polarisation des raies observées. L'écart entre les différentes composantes croît linéairement avec l'intensité du champ magnétique ; cet effet est relié au terme paramagnétique et porte le nom d'effet Zeeman. La décomposition des raies spectrales fut systématiquement étudiées pour de nombreux éléments et pour des champs d'intensité variable. L'intensité du champ magnétique était même suffisante pour que l'énergie paramagnétique soit supérieure à l'énergie d'interaction spin-orbite tout en restant négligeable devant le terme d'énergie électrostatique. Les différents comportements purent être totalement expliqués grâce aux travaux de Paschen et Back (1912), de Landé (1926) et à la découverte du spin et du moment magnétique de l'électron par Uhlenbeck et Goudsmit (1925).

Pour les niveaux profonds, l'effet du terme diamagnétique était trop faible et il fallut attendre que Jenkins et Segré [62] en 1939 étudient les spectres d'absorption du sodium et du potassium en présence d'un champ magnétique de 2,7 T pour des niveaux de nombre quantique principal n variant de 10 à 30 pour mettre en évidence l'existence de l'effet diamagnétique.

Pour des faibles valeurs du nombre quantique principal $n \approx 10$, le spectre observé présentait toutes les caractéristiques de l'effet Paschen-Back. En ne tenant compte que du seul terme paramagnétique, une raie en polarisation π coïncide avec la transition non perturbée ν_0 ; de part et d'autre de la raie centrale et de façon symétrique apparaissent deux raies en polarisation σ^+ et σ^- (Fig.1.a). Pour des valeurs de n plus élevées, les raies se déplacent vers de plus grandes fréquences ; pour interpréter ce phénomène, il est indispensable de tenir compte d'un terme variant de façon quadratique avec l'intensité du champ B. Le déplacement des raies σ^+ et σ^- est deux fois plus élevé que celui $\Delta\nu_D$ de la raie en polarisation π (Fig.1.b). Ce déplacement exprimé en Hertz est donné par

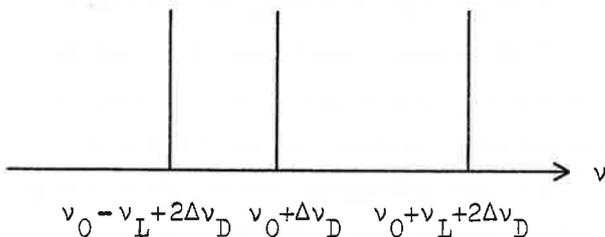
$$\Delta\nu_D(\text{Hz}) = 1,49 \cdot 10^{+4} \cdot n^4 \cdot B^2$$

où B est donné en Teslas.



Position des raies sans le terme diamagnétique (1.a).

ν_L : Fréquence de Larmor



avec le terme diamagnétique (1.b).

Une explication théorique de cet effet diamagnétique fut donnée par Schiff et Snyder la même année [64].

Pour ces niveaux, les effets paramagnétiques et diamagnétiques sont du même ordre de grandeur et restent une perturbation par rapport au terme coulombien. Qu'allait-il se passer pour des niveaux encore plus excités où l'énergie de liaison coulombienne, qui décroît comme $1/n^2$, devient très faible mais où l'énergie diamagnétique croît suivant la puissance quatrième du nombre quantique principal et comme le carré de l'intensité du champ magnétique ?

En 1969, Garton et Tomkins [24] grâce à un spectrographe à réseau de haute résolution et de grande luminosité enregistrent le spectre d'absorption du baryum dans un champ magnétique de 2,4 T. Le domaine spectral étudié s'étend jusqu'au-delà de la limite d'ionisation en champ nul. Ce spectre révèle deux phénomènes nouveaux. Tout d'abord, il apparaît pour chaque valeur de n , allant de $n = 28$ à $n = 40$, un multiplet présentant des raies satellites ayant une fréquence plus faible que celle de la raie principale. De plus, de façon surprenante, dans la zone s'étendant de part et d'autre de la limite d'ionisation en champ nul, on observe une modulation du signal d'absorption à une fréquence voisine de 1,5 fois la fréquence cyclotron $h\omega_c$. Ces résonances observées dans le continuum sont appelées résonances de Quasi-Landau. Ces observations originales ont entraîné un regain d'intérêt pour ce sujet et de nombreuses études aussi bien expérimentales que théoriques, ont été entreprises dans les quinze dernières années. (Voir les articles de revues, réf. [114] et [115]). Pour des champs magnétiques très intenses comme ceux rencontrés dans certains objets astrophysiques, l'effet du terme diamagnétique peut dominer l'interaction coulombienne aussi s'intéresse-t-on au cas limite de l'électron dans un champ magnétique et perturbé par une faible attraction coulombienne. Le comportement de l'électron libre en présence d'un champ magnétique est connu depuis les travaux de Landau en 1930 [25]. Les champs magnétiques accessibles au laboratoire ne sont pas suffisamment intenses pour étudier un tel comportement sur l'atome. Mais des domaines de la physique comme la physique des solides possèdent des systèmes permettant d'étudier ces effets. Ainsi, le système électron-trou ou "exciton" présente une situation où la force coulombienne est très fortement atténuée par la forte constante diélectrique du milieu et où l'exciton possède une masse effective, déterminée par la structure de bandes, très inférieure à la masse de l'électron libre. On peut ainsi observer sur un tel système, l'effet qu'aurait sur l'atome d'hydrogène un champ de 10^4 à 10^6 Teslas [116]. De tels champs existent dans des objets astrophysiques [117] comme les étoiles naines blanches (10^3 T) ou les pulsars (10^8 T) ; l'étude de l'atome soumis à un champ magnétique intense a donc une importance particulière pour l'interprétation des spectres observés en astrophysique. Les niveaux profonds de l'atome sont alors très perturbés. De nombreuses théories sur l'hydrogène en champ très intense se sont développées dans les dix dernières années, elles sont souvent communes aux deux domaines astrophysique et physique du solide. En physique atomique, de nombreuses expériences ont vu le jour pour tenter d'expliquer

les phénomènes nouveaux découverts par Garton et Tomkins. Elles s'avèrent nécessaires surtout en l'absence de théorie exacte, pour accéder aux différents paramètres du problème.

La zone de champ faible où l'interaction diamagnétique se traite en perturbation par rapport à l'interaction coulombienne bénéficie de la possibilité de calculs effectués par diagonalisation de l'hamiltonien total du système sur un ensemble d'états de dimension finie. Les résultats expérimentaux sont en général reproduits aisément par ces calculs. Des comportements assez particuliers apparaissent dans les différents spectres, et il serait intéressant de comprendre à l'aide de modèles physiques simples les phénomènes observés. Aussi, cette région fait l'objet d'études théoriques très poussées et il a été mis en évidence une symétrie approchée d'abord par des méthodes de mécanique classique [15,16], puis semi-classique [34,72→74,79,80] et enfin quantique [75,76]. Tout récemment, un formalisme quantique basé sur la théorie des groupes a permis une formulation simple de cette symétrie [17,33,106].

Lorsque les interactions coulombienne et diamagnétique deviennent du même ordre de grandeur, on passe à la zone de Quasi-Landau beaucoup moins bien connue. D'un point de vue théorique, aucun traitement à un ordre de perturbation faible n'est possible et le physicien est entièrement tributaire des résultats expérimentaux. Les modulations obtenus par Garton et Tomkins, dont la périodicité était proportionnelle à la fréquence cyclotron, ont pu être expliquées qualitativement par des modèles classiques unidimensionnels [20,24,36,66,87→89] ou par des lois d'échelles [31,34]. Mais il s'avère que ces modulations possèdent des sous-structures [7,33,40,82] et qu'en dessous de la limite d'ionisation en champ nul, il s'agit-se même plutôt de résonances étroites [7,82]. Les modulations de Quasi-Landau sont donc le résultat d'une convolution due aux conditions expérimentales : dans les expériences en cellule, l'effet Doppler et l'effet du champ électrique motionnel (champ électrique vu par l'atome en mouvement dans le champ magnétique) sont certainement à mettre en cause. Des configurations mieux définies, permettant l'élimination de ces effets, sont possibles lorsqu'on travaille sur jet atomique. Les résultats n'en sont souvent que meilleurs [82] et des expériences de ce type sont très prometteuses.

Dans cette zone, la partie située au dessus de la limite d'ionisation en champ nul est encore plus mal connue, en particulier les phénomènes d'ionisation en présence de champ magnétique n'ont été que très peu étudiés. La raison en est peut être la nécessité de conditions expérimentales très strictes (en particulier, l'élimination du champ électrique motional).

A ce stade, il semble évident que plus les résultats expérimentaux seront nombreux et correspondront à une grande résolution et à des conditions expérimentales parfaitement déterminées, plus la recherche de théories permettant l'interprétation des phénomènes mis en évidence sera motivée et facilitée. Dans ce but, puisque seule la zone diamagnétique est bien connue, il serait intéressant de comprendre l'évolution lente des états de cette zone vers les états de Quasi-Landau et au-delà et aussi de faire se recouvrir les domaines de validité des différents modèles approchés déjà existant. Un pas dans ce sens a été fait puisque les états de Quasi-Landau semblent être le prolongement des états de la zone diamagnétique peuplés de façon privilégiée par le processus d'excitation optique. Il nous faut poursuivre cet effort.

Dans cette thèse sont rapportés les travaux effectués au laboratoire Aimé Cotton concernant l'étude des spectres de photoexcitation en présence d'un champ magnétique intense et de photoionisation d'atomes de lithium. Dans un premier chapitre, nous avons tenu à présenter le problème en insistant sur les difficultés propres à la nature du champ magnétique en particulier, la non séparabilité de l'hamiltonien quantique même pour un atome aussi simple que l'atome d'hydrogène. Dans un second chapitre, nous avons rappelé les différents modèles théoriques approchés existant en précisant leur domaine de validité. Le rapport entre interaction magnétique et interaction coulombienne est le facteur déterminant dans toutes ces descriptions qu'elles soient classiques, semi-classiques ou quantiques. Le troisième chapitre est consacré à la description de notre dispositif expérimental. Les choix que nous avons faits ont été dictés par le souci de mettre au point un dispositif expérimental aussi performant que possible (haute résolution, géométrie bien définie, détecteur sensible) mais aussi par l'analyse des résultats obtenus dans des expériences antérieures que nous rappelons alors [31,81]. Ceci nous a amenés à travailler non pas en cellule mais sur jet atomique. De ce fait, nous avons été confrontés à certaines difficultés expérimentales liées à la présence du champ magnéti-

que ; celles-ci ont parues intéressantes à décrire. La part importante prise par ce troisième chapitre reflète, je l'espère, le rôle qu'a joué pour moi ces premiers contacts avec l'expérimentation. Dans le quatrième chapitre, nous exposerons nos résultats expérimentaux. Pour la première fois, nous avons mis en évidence dans la zone de champ faible des comportements prévus par des théories toutes récentes. Nous avons aussi étudié le passage progressif de cette zone où un traitement perturbatif est possible à la zone de Quasi-Landau au voisinage de la limite d'ionisation en champ nul ; nous verrons les difficultés d'interprétation que nous avons rencontrées. Enfin, nous terminerons ce chapitre par une étude tout à fait originale des seuils de photoionisation Stark en présence de champ magnétique et nous en donnerons une interprétation semi-classique.

Chapitre I

POSITION DU PROBLEME

Ce premier chapitre a pour but d'exposer les difficultés de résolution du problème général de l'atome en présence de champ magnétique uniforme et indépendant du temps, tant d'un point de vue classique en termes de forces et de trajectoire que d'un point de vue quantique en termes d'Hamiltonien et de fonctions d'onde. Dans l'une ou l'autre optique, l'importance des propriétés d'invariance du système dans des transformations de symétrie sera mise en évidence et l'on s'appuiera sur des comparaisons avec d'autres problèmes parfaitement résolus, par exemple l'atome d'Hydrogène en présence d'un champ électrique statique uniforme. Dans tout cet exposé, nous nous plaçons dans l'approximation non relativiste où l'énergie totale d'une particule de masse m diffère peu de l'énergie liée à sa masse $E_0 = m c^2$. Cette valeur est choisie comme origine de référence pour l'énergie E de la particule ; par conséquent on supposera toujours que $|E| \ll m c^2$.

I - Les forces en présence.

L'atome est constitué de Z électrons de charge électrique q gravitant autour d'un noyau de numéro atomique Z sous l'action des forces coulombiennes.

Lorsqu'on le plonge dans un champ magnétique $\vec{B}(\vec{r}, t)$ chaque particule de charge q subit de plus la force de Lorentz $\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}(\vec{r}, t)$ proportionnelle à sa vitesse \vec{v} .

Nous allons nous limiter pour plus de simplicité au cas d'un champ statique uniforme et à l'atome d'Hydrogène qui ne comporte que deux particules chargées : un proton et un électron, respectivement de charge $-q$ et q . Les forces en présence sont alors :

- les forces coulombiennes

$$\vec{F}_{E2} = -\vec{F}_{E1} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^3} ;$$

- les forces magnétiques

$$\begin{aligned} \vec{F}_{M1} &= -q \vec{v}_1 \times \vec{B} , \\ \vec{F}_{M2} &= q \vec{v}_2 \times \vec{B} ; \end{aligned}$$

les indices 1 et 2 se rapportent respectivement au noyau (de charge $-q$) et à l'électron (de charge $+q$) ;

\vec{r}_i désigne la position de la particule i , \vec{v}_i sa vitesse, $\vec{\gamma}_i$ son accélération et m_i sa masse ($i = 1, 2$).

Le principe fondamental de la dynamique conduit au système de deux équations

$$\left\{ \begin{aligned} m_1 \vec{\gamma}_1 &= \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^3} - q \vec{v}_1 \times \vec{B} & (1) \\ m_2 \vec{\gamma}_2 &= \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}_2 - \vec{r}_1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|^3} + q \vec{v}_2 \times \vec{B} & (2) \end{aligned} \right.$$

La résolution d'un tel problème à deux corps n'est pas aisée.

En champ magnétique nul, on peut transformer le système d'équations (1) et (2) en :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} (m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2) = \vec{0} \\ \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \frac{d^2}{dt^2} (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^3} \end{array} \right. \quad (3) \quad (4)$$

On peut alors découpler le mouvement de translation uniforme du centre de gravité \vec{R}_G , $M \vec{R}_G = m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2$, affecté de la masse totale $M = m_1 + m_2$, et le mouvement relatif correspondant à une particule fictive de masse $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$, appelée masse réduite, repérée par la position relative $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$ et soumise à la force centrale $\frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|^3}$.

En présence d'un champ magnétique, on n'aboutit pas à un résultat aussi simple : l'addition des équations (1) et (2) conduit à

$$m_1 \vec{\gamma}_1 + m_2 \vec{\gamma}_2 = -q (\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \times \vec{B}$$

$$\text{soit} \quad \frac{d}{dt} (m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2 + q (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \times \vec{B}) = 0$$

$$\text{ou} \quad \frac{d}{dt} (M \vec{v}_G - q \vec{r} \times \vec{B}) = 0$$

$$\text{avec} \quad \vec{v}_G = \frac{d}{dt} \vec{R}_G$$

$$\text{soit} \quad M \vec{v}_G - q \vec{r} \times \vec{B} = \vec{c} \quad \text{constante} \quad (5)$$

Le mouvement du centre de masse n'est plus un mouvement de translation uniforme. De plus, il est couplé avec le mouvement relatif. On peut à l'aide de l'équation (5) trouver l'équation du mouvement relatif :

$$\mu \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|^3} + q \frac{\vec{c}}{M} \times \vec{B} + \frac{q^2}{M} (\vec{r} \times \vec{B}) \times \vec{B} + q \left(1 - \frac{2\mu}{M}\right) \vec{v} \times \vec{B} \quad (6)$$

Nous remarquons déjà l'apparition de termes supplémentaires tel que $q \frac{\vec{c}}{M} \times \vec{B}$ qui peut être associé à la force créée par un champ électrique $\frac{\vec{c}}{M} \times \vec{B}$. Nous décrirons plus précisément ces termes avec le formalisme quantique dans les paragraphes II.2. et II.3. du second chapitre.

Pour l'instant, nous nous limiterons à des remarques simples de mécanique

classique et nous pourrions simplifier l'équation (6) en considérant le noyau de masse infinie et situé à l'origine des coordonnées.

On pose alors dans l'équation (6), $\mu=m$ et $M=\infty$. Le mouvement de l'électron est alors décrit par

$$m \vec{\gamma} = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}}{r^3} + q \vec{v} \times \vec{B} \quad (7)$$

dont une résolution analytique exacte n'est pas possible.

On ne peut alors que procéder à des calculs numériques afin de visualiser les trajectoires dont l'allure dépendra fortement des conditions initiales.

Les deux cas extrêmes où l'une des deux forces est nulle sont particulièrement intéressants car des solutions analytiques exactes existent alors :

- si la force coulombienne est nulle, le problème est celui d'un électron dans un champ magnétique uniforme ; les trajectoires sont alors des hélices d'axes parallèles à la direction de \vec{B} , parcourues à la vitesse angulaire $\omega_c = \frac{-q B}{m}$ (pulsation cyclotron) dans le sens direct ;
- si la force magnétique est nulle, le mouvement est celui d'une particule soumise à une force centrale coulombienne passant par le point fixe 0. Les trajectoires dépendent des conditions initiales, en particulier du signe de l'énergie totale. Ce sont des hyperboles, des paraboles ou des ellipses dont un des foyers est le point 0.

Il est important de souligner que l'existence de solutions exactes pour ces deux problèmes est reliée directement aux propriétés de symétrie du système étudié. Le problème d'un électron soumis uniquement à un champ magnétique uniforme possède en effet la symétrie cylindrique autour de l'axe du champ magnétique.

Ce problème de "l'électron de Landau" est de plus invariant par une translation quelconque ; il n'est donc pas totalement équivalent à celui de l'atome à un seul électron, possédant un noyau infiniment lourd soumis à un champ magnétique uniforme, superintense (c'est-à-dire tel que

l'énergie d'interaction coulombienne soit négligeable devant l'énergie d'interaction magnétique). Dans ce cas, où l'on définit une origine particulière, ne subsiste qu'une symétrie de révolution. Lorsque seule la force coulombienne est présente, l'électron est soumis à un potentiel scalaire possédant la symétrie sphérique autour du point fixé 0. De plus, il existe une symétrie supplémentaire commune à tous les potentiels variant comme $-\frac{1}{r}$ (problème de Kepler) [1], que nous expliciterons dans le prochain paragraphe de ce premier chapitre.

Lorsque les deux forces agissent simultanément, seule subsiste la symétrie de révolution autour de l'axe passant par le noyau et parallèle à la direction du champ magnétique \vec{B} . Ceci ne suffit pas, a priori, pour trouver la forme des trajectoires. S'il se trouve que l'une des forces est petite devant l'autre, il est toujours possible de traiter son effet de manière perturbative. Mais, dans le cas général, le rapport des deux forces varie selon le point de la trajectoire considéré et on ne peut que conclure au comportement instantané de l'électron.

En conclusion, les difficultés que nous avons soulevées en mécanique classique vont se retrouver dans une description quantique en termes de séparabilité ou de non séparabilité de l'Hamiltonien du système. Revenons donc d'abord sur cette notion en examinant quelques cas simples. C'est l'objet du paragraphe suivant.

II - La séparabilité de l'Hamiltonien.

1. Propriétés de symétrie et séparabilité.

Abordons maintenant le point de vue quantique. Considérons un ensemble de particules (sans spin) de masse m_i , de charge q_i pouvant interagir entre elles et soumises à un champ électromagnétique extérieur statique, caractérisé par les vecteurs champ électrique $\vec{F}(\vec{r})$ et champ magnétique $\vec{B}(\vec{r})$. Ce champ électromagnétique peut être décrit par la jauge $[\vec{A}_e(\vec{r}), U_e(\vec{r})]$ définissant les potentiels vecteur et scalaire extérieurs et telle que

$$\vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla} U_e(\vec{r}) \quad \vec{B}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}_e(\vec{r}) \quad . \quad (8)$$

L'Hamiltonien du système est alors :

$$H = \sum_i \frac{1}{2m_i} [\vec{P}_i - q_i \vec{A}_e(\vec{R}_i)]^2 + V(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) \quad (9)$$

\vec{R}_i désigne la position de la particule i et \vec{P}_i son impulsion (variable conjuguée de \vec{R}_i). La quantité de mouvement de cette particule est donnée par

$$\vec{\pi}_i = \vec{P}_i - q_i \vec{A}_e(\vec{R}_i) \quad . \quad (10)$$

Le potentiel $V(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots)$ ne dépend que de la position des particules et est donnée par

$$V(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) = \sum_i q_i U_e(\vec{R}_i) + \underline{V}(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) \quad (11)$$

où \underline{V} représente l'énergie potentielle d'interaction électrostatique entre les particules chargées [2] .

Il est à noter que la forme explicite de l'Hamiltonien dépend de la jauge choisie. Les propriétés physiques sont bien sûr indépendantes du choix de la jauge. Dans la suite de cet exposé, nous utilisons la jauge cylindrique où le potentiel vecteur s'écrit sous la forme

$$\vec{A}_e(\vec{r}) = -\frac{1}{2} \vec{r} \times \vec{B}(\vec{r}) \quad . \quad (12)$$

En mécanique quantique un tel système est complètement résolu si l'on peut déterminer les énergies E_β et les fonctions d'onde $|\Psi_\beta\rangle$ décrivant les états stationnaires du système et formant une base complète de l'ensemble des états.

A l'instant initial $t_0=0$ la fonction d'onde $|\Psi_0\rangle$ décrivant le système peut être décomposée sur cette base $|\Psi_\beta\rangle$,

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{\beta} a_{\beta}^0 |\Psi_{\beta}\rangle .$$

L'état du système est décrit à l'instant t par la fonction d'onde

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\beta} a_{\beta}^0 |\Psi_{\beta}\rangle e^{-i \frac{E_{\beta}}{\hbar} t}$$

avec $H |\Psi_{\beta}\rangle = E_{\beta} |\Psi_{\beta}\rangle$.

Dans le cas général la résolution de cette équation de Schrödinger conduit à étudier un problème complexe à plusieurs variables (coordonnées des particules). Cependant, si l'Hamiltonien H est invariant dans une transformation de symétrie donnée S , ce problème peut être simplifié en utilisant un système de coordonnées conduisant à la séparation des variables. Remarquons que les transformations de symétrie considérées habituellement sont associées soit à des déplacements géométriques dans l'espace des positions des différentes particules (translation, réflexion, rotation...), soit à des permutations des coordonnées pour des particules identiques. Il existe également d'autres transformations, dépendant des propriétés dynamiques du système et conservant l'équation de Schrödinger ; ces dernières sont associées à des "symétries dynamiques" [3].

Lorsqu'une transformation de symétrie S existe, elle est associée à une constante du mouvement, valeur propre d'un opérateur θ_S qui commute avec H . Ceci permet alors de chercher les fonctions $|\Psi_{\beta}\rangle$ comme fonctions propres communes à H et θ_S , ce qui simplifie la résolution du problème.

Prenons deux exemples concrets :

- si H est invariant dans la transformation d'inversion $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$, la parité totale est une constante du mouvement et l'on cherchera des fonctions d'onde de parité déterminée $\Pi_t = \pm 1$;
- si dans une jauge choisie le potentiel vecteur \vec{A}_e est nul et si le potentiel scalaire ne dépend que des positions relatives des différentes particules $(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$, le système est invariant dans une translation globale du système $\vec{R}_i \rightarrow \vec{R}_i + \vec{T}$. Dans ce cas l'impulsion totale $\vec{P} = \sum_i \vec{P}_i$ est une constante du mouvement ($[H, \vec{P}] = \vec{0}$). On peut alors séparer le mouvement du centre de masse, du mouvement relatif des particules. Un exemple de ce type est celui de l'atome d'Hydrogène supposé isolé ; ce problème a été décrit en termes de mécanique classique dans le paragraphe précédent (*).

L'Hamiltonien s'écrit en posant $e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$

$$H = \frac{\vec{P}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{P}_2^2}{2m_2} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

que l'on peut écrire :

$$H = \frac{\vec{P}_G^2}{2M} + \frac{\vec{P}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\vec{r}|}$$

avec

$$\begin{aligned} \vec{r} &= \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \\ \vec{P} &= \frac{m_1 \vec{p}_2 - m_2 \vec{p}_1}{m_1 + m_2} \\ &= \mu \frac{d\vec{r}}{dt} \end{aligned}$$

$$\vec{P}_G = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \tag{13}$$

* Dans le formalisme quantique, les coordonnées seront notées de façon indifférente \vec{r} ou \vec{R} dans l'Hamiltonien et on écrira toujours les fonctions d'onde en représentation \vec{r} .

où \vec{P} désigne l'impulsion relative, μ la masse réduite, \vec{r} la coordonnée relative, M la masse totale, \vec{P}_G l'impulsion totale du système. On pourra donc écrire :

$$H = H_G + H_r \quad \text{avec} \quad [H_G, H_r] = 0 \quad \text{et} \quad H_G = \frac{P_G^2}{2M} \quad . \quad (14)$$

On a donc ainsi séparé l'Hamiltonien en deux parties indépendantes qui commutent. Cela permet de chercher les fonctions d'onde $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ sous la forme $\Psi(\vec{r}, \vec{r}_G) = f(\vec{r}) g(\vec{r}_G)$,

\vec{r}_G étant la position du centre de masse.

Le moment cinétique total du système

$$\vec{L}_T = \vec{r}_1 \times \vec{p}_1 + \vec{r}_2 \times \vec{p}_2 \quad (15)$$

s'écrit dans le cas présent (deux particules en interaction, l'énergie potentielle ne dépendant que de la position relative des deux particules)

$$\vec{L}_T = \vec{L} + \vec{L}_G \quad (16)$$

$$\text{avec} \quad \begin{cases} \vec{L}_G = \vec{R}_G \times \vec{P}_G & \text{et} \quad [\vec{L}_G, \vec{L}] = 0 \\ \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \end{cases}$$

\vec{L} représente le moment cinétique de la particule fictive de masse μ .

Les mouvements du centre de masse et de la particule fictive décrite par la coordonnée \vec{r} sont alors dits séparables. L'Hamiltonien de la particule réduite s'écrit alors

$$H_r = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\vec{r}|} \quad .$$

L'équation de Schrödinger qui s'en déduit est une équation linéaire aux dérivées partielles dépendant de trois coordonnées spatiales. La résolution de cette équation est possible si l'on trouve un système de coordonnées adapté pour lequel on puisse séparer les variables d'espace.

Les différents systèmes usuels sont

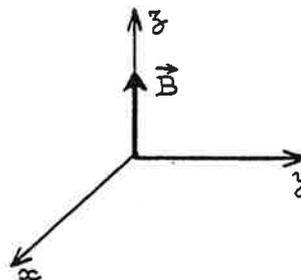
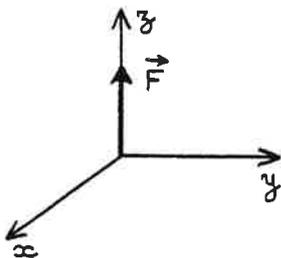
- x, y, z coordonnées cartésiennes
- r, θ, φ coordonnées sphériques
- ρ, z, φ coordonnées cylindriques
- $\xi = r+z, \eta = r-z, \varphi$ coordonnées paraboliques.

Dans le cas de l'atome d'Hydrogène isolé (sans spin), la séparation de l'Hamiltonien est possible en coordonnées sphériques et paraboliques à cause des propriétés de symétrie. La séparation en coordonnées sphériques semble très compréhensible puisque l'Hamiltonien est invariant par rotation. La séparation en coordonnées paraboliques est également possible et correspond à une symétrie dynamique caractéristique du potentiel coulombien [4]. Nous reviendrons sur ce point plus loin.

Sur ces exemples on saisit bien l'importance de l'étude des propriétés de transformations de symétrie du système qui peut conduire à séparer d'une part mouvement du centre de masse et mouvement relatif, d'autre part les mouvements suivant les différentes coordonnées spatiales.

Lorsque nous plaçons l'atome d'Hydrogène dans un champ électrique ou magnétique statique, l'interaction des deux particules avec ce champ est décrite par un potentiel, scalaire ou vecteur, qui rompt une partie des symétries existantes en champ nul. Nous avons choisi de comparer les deux problèmes suivants :

- l'atome d'Hydrogène plongé dans un champ électrique \vec{F} statique uniforme de direction Oz ;
- l'atome d'Hydrogène plongé dans un champ magnétique statique uniforme de direction Oz :



Si géométriquement ces deux problèmes se présentent de la même manière, rappelons que les deux vecteurs \vec{F} et \vec{B} ne sont pas de même nature puisque \vec{F} est polaire alors que \vec{B} est axial (\vec{F} dérive d'un potentiel scalaire et \vec{B} d'un potentiel vecteur).

La nature fondamentalement différente des deux problèmes (\vec{F} et \vec{B}) se retrouve dans l'étude de la séparabilité entre mouvement du centre de masse et mouvement relatif. En effet, dans le problème de l'atome d'Hydrogène soumis à un champ électrique uniforme, ces mouvements sont totale-ment séparés et l'impulsion totale \vec{P}_G est une constante du mouvement. Par contre, dans le cas d'un champ magnétique uniforme, mouvement du centre de masse et mouvement relatif sont couplés. Cependant, ce dernier problème peut être réduit [5], c'est-à-dire que l'on peut isoler, dans les fonctions d'onde, la dépendance par rapport aux variables du centre de masse et écrire en utilisant la jauge cylindrique (éq. (12)) et réf. [6]

$$\Psi_{\vec{c}}(\vec{r}_G, \vec{r}) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\vec{c} + \frac{q}{2} \vec{r} \times \vec{B}) \cdot \vec{r}_G \right] \cdot \Phi_{\vec{c}}(\vec{r})$$

où \vec{c} correspond à la constante du mouvement

$$\vec{c} = \vec{P}_G - \frac{q}{2} \vec{R} \times \vec{B} \quad ;$$

notons que \vec{c} ne peut être identifiée ni à \vec{P}_G ni à $\vec{\Pi}_G$.

$\Phi_{\vec{c}}(\vec{r})$ est fonction propre d'un Hamiltonien réduit, $H_{R,\vec{c}}$ dépendant de la constante \vec{c} . Pour plus de détails nous renvoyons le lecteur à la référence [7] et au §. II.2. du chapitre suivant.

Malgré la non séparabilité du problème du champ magnétique, il n'en demeure pas moins que les deux problèmes étudiés (\vec{F} et \vec{B}) possèdent la symétrie de révolution autour de la direction du champ extérieur. Ceci permet de se ramener à l'étude d'un problème à deux dimensions, la dimension Oz ayant été correctement choisie. Dans l'un et l'autre cas, pour pouvoir résoudre totalement le problème, il est nécessaire de trouver une symétrie supplémentaire.

Notre but est d'étudier la possibilité de l'existence d'une telle symétrie et, éventuellement, de trouver la constante du mouvement qui est associée. Là encore, les deux problèmes envisagés ont un comportement totalement différent, comme nous le verrons un peu plus loin.

Si, en présence d'un champ d'intensité quelconque - \vec{B} par exemple -, une telle symétrie notée $\mathcal{S}(\vec{B})$ existe, elle sera associée à une constante du mouvement $\theta_{\mathcal{S}}(\vec{B})$ dépendant de \vec{B} . On peut écrire l'Hamiltonien du système total sous la forme

$$H_{\vec{B}} = H_{\vec{B}=\vec{0}} + H_1$$

où $H_{\vec{B}=\vec{0}}$ correspond à l'Hamiltonien du système isolé. Si on fait tendre \vec{B} vers $\vec{0}$

$$\begin{cases} \mathcal{S}(\vec{B}) \rightarrow \mathcal{S}(\vec{0}) \\ H_{\vec{B}} \rightarrow H_{\vec{B}=\vec{0}} \end{cases}$$

alors $\theta_{\mathcal{S}}(\vec{0})$ et $H_{\vec{B}=\vec{0}}$ commutent : la propriété de symétrie cherchée $\mathcal{S}(\vec{B})$ doit donc être associée à une propriété de symétrie $\mathcal{S}(\vec{0})$ du système isolé.

Dans un premier paragraphe, nous allons donc rappeler quelles sont les propriétés de symétrie et les constantes du mouvement de l'atome d'Hydrogène isolé, en particulier cette symétrie dynamique, déjà évoquée, liée à la forme particulière du potentiel coulombien ($1/r$).

Dans un second paragraphe, nous nous intéresserons à l'atome en champ électrique et à la forme de la symétrie rendant possible la séparabilité.

Enfin, dans un dernier paragraphe, nous verrons qu'il est impossible de séparer complètement le problème de l'atome en champ magnétique.

2. Les symétries particulières de l'atome d'Hydrogène.

En mécanique classique Lagrangienne [3, 8] le théorème de Noether donne une méthode pour trouver une constante du mouvement lorsque le Lagrangien du système se comporte de manière simple lors d'une transformation de symétrie. Par exemple, pour l'atome d'Hydrogène, la symétrie sphérique, traduite par l'invariance du Lagrangien lors de la transformation $\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \delta\epsilon \vec{u} \times \vec{r}$ (rotation infinitésimale d'un angle $\delta\epsilon$ autour du vecteur \vec{u}) entraîne l'existence de la constante du mouvement $l_u = \vec{l} \cdot \vec{u}$ où \vec{l} est le moment cinétique de la particule.

De la même façon, dans le problème de Kepler non relativiste correspondant à une énergie potentielle à symétrie sphérique donnée par $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$, le comportement du Lagrangien lors de la transformation $\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \delta\epsilon \vec{u} \times \vec{l}$ traduit l'existence de la constante $a_u = \vec{a} \cdot \vec{u}$ où \vec{a} est le vecteur de Runge Lenz

$$\vec{a} = \frac{1}{m} (\vec{p} \times \vec{l}) - Ze^2 \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} \quad \text{vérifiant} \quad \vec{l} \cdot \vec{a} = 0 \quad .$$

Classiquement les invariances au cours du temps $\frac{d\vec{l}}{dt} = \frac{d\vec{a}}{dt} = \vec{0}$ ont une interprétation simple : la trajectoire est dans le plan orthogonal à \vec{l} . Dans ce plan l'équation de la trajectoire est donnée par :

$$\vec{a} \cdot \vec{r} = \frac{\vec{l}^2}{m} - Ze^2 r$$

\vec{a} est donc un axe de symétrie pour la trajectoire.

Pour les énergies négatives, la trajectoire est fermée ; c'est une ellipse dont le grand axe a pour direction \vec{a} et d'excentricité proportionnelle à $|\vec{a}|$. L'origine des coordonnées est située à un des foyers de la trajectoire.

En mécanique quantique, les opérateurs sont des constantes du mouvement s'ils commutent avec l'Hamiltonien. C'est le cas des trois composantes du moment cinétique \vec{L} et de celles du vecteur de Runge Lenz quantique \vec{A}

$$\vec{A} = \frac{1}{2m} (\vec{P} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{P}) - z e^2 \frac{\vec{R}}{|\vec{R}|} ,$$

$$[H_0, \vec{L}] = [H_0, \vec{A}] = \vec{0} .$$

De plus on peut montrer que [9a, 9b, 10]

$$[A_i, A_j] = - \frac{2i \hbar}{m} \epsilon_{ijk} H_0 L_k ,$$

$$[L_i, A_j] = i \hbar \epsilon_{ijk} A_k .$$

L'existence d'un ensemble complet d'observables qui commutent (E.C.O.C.) permet de résoudre le problème dans un système de coordonnées bien choisi. Dans le cas de l'Hydrogène, il existe deux E.C.O.C. indépendants. L'E.C.O.C. (H_0, L^2, L_z) conduit à la résolution de l'atome d'Hydrogène en coordonnées sphériques (r, θ, φ) . L'E.C.O.C. (H_0, L_z, A_z) conduit à sa résolution en coordonnées paraboliques $(\xi = r+z, \eta = r-z, \varphi)$ [4]. Dans ce dernier cas, le lien entre l'E.C.O.C. et le système de coordonnées n'est pas immédiat. La séparation en coordonnées paraboliques est liée à une propriété de symétrie spécifique du champ coulombien $(1/r^2)$ qui peut être décrite par le groupe de symétrie $O(4)$ dans un espace euclidien de dimension 4 [11]. Elle correspond également à la dégénérescence "accidentelle" des niveaux d'énergie de l'atome d'Hydrogène : l'énergie ne dépend pas de $\ell(\ell+1)$ valeur propre du moment cinétique \vec{L}^2 , mais uniquement du nombre quantique principal n .

3. L'atome d'Hydrogène en champ électrique.

Nous nous plaçons dans le cadre d'une étude non relativiste de l'atome d'Hydrogène perturbé par la présence d'un champ électrique statique uniforme \vec{F} dirigé suivant l'axe Oz . Pour simplifier, le noyau est supposé de masse infinie et placé à l'origine des coordonnées. Dans ces conditions, l'Hamiltonien s'écrit [3] :

$$H_F = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - q \vec{F} \cdot \vec{r} .$$

Le potentiel d'interaction de l'électron avec le champ électrique rompt

la symétrie sphérique et ne conserve que la symétrie de révolution autour de l'axe Oz. Parmi les trois composantes du moment cinétique \vec{L} seule L_z commute avec l'Hamiltonien. Les fonctions propres de H peuvent être cherchées comme fonctions propres de L_z . Leur dépendance suivant la coordonnée φ s'écrit donc $\frac{e^{iM\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$ où M est la valeur propre de L_z (*). Nous avons donc ainsi séparé la partie dépendant de φ de la fonction d'onde totale.

En coordonnées cylindriques l'équation de Schrödinger s'écrit avec

$$\Psi(\rho, z, \varphi) = \chi(\rho, z) \frac{e^{iM\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \chi(\rho, z) \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \chi(\rho, z) - \frac{M^2}{\rho^2} \chi(\rho, z) \right]$$

$$+ \left(- \frac{e^2}{\rho^2 + z^2} - q F_z \right) \chi(\rho, z) = E \chi(\rho, z) \quad (17)$$

Le problème est devenu bidimensionnel, il ne se sépare pas en coordonnées cylindriques. Cherchons une autre constante du mouvement pouvant permettre de poursuivre la résolution. Le vecteur de Runge Lenz quantique \vec{A} ne commute plus avec l'Hamiltonien. Cependant en s'intéressant aux équations d'évolution classiques [12], il apparaît que :

$$\frac{d}{dt} \left[\mathcal{A} - \frac{1}{2} q (\vec{r} \times \vec{F}) \times \vec{r} \right] = - \frac{3}{2} \frac{q}{m} \vec{l} \times \vec{F} \quad (18)$$

La composante selon la direction de \vec{F} du vecteur \vec{m} défini par $\vec{m} = \mathcal{A} - \frac{1}{2} q (\vec{r} \times \vec{F}) \times \vec{r}$ est donc une constante du mouvement.

On vérifie facilement que la troisième composante M_z de l'analogie quantique

$$\vec{M} = \vec{A} - \frac{1}{2} q (\vec{r} \times \vec{F}) \times \vec{F}$$

commute avec H. Le vecteur \vec{M} est appelé "vecteur de Runge Lenz généralisé". En champ électrique nul, \vec{M} se confond avec \vec{A} . M_z commute avec L_z et l'ensemble (H_F, L_z, M_z) forme un ensemble complet d'observables qui commutent.

* Sauf précision contraire dans la suite de cet exposé, nous utilisons les unités du système international.

D'une manière analogue à l'E.C.O.C. (H_0, L_z, A_z) pour l'atome d'Hydrogène en champ nul, l'existence de l'E.C.O.C. (H_F, L_z, M_z) entraîne la séparabilité en coordonnées paraboliques [4].

Dans ce système, l'équation de Schrödinger $H \Psi(\xi, \eta, \varphi) = E \Psi(\xi, \eta, \varphi)$ s'écrit en unités atomiques, u.a. :

$$\frac{2}{\xi+\eta} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{2\xi\eta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \left(\frac{2}{\xi+\eta} - (\xi-\eta) \frac{F}{2} \right) \Psi + E \Psi = 0 \quad (19)$$

On recherche Ψ sous la forme

$$\Psi(\xi, \eta, \varphi) = \frac{e^{iM\varphi}}{\sqrt{2\pi}} f_1(\xi) f_2(\eta) \quad .$$

On obtient alors les deux équations

$$\left\{ \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{d}{d\xi} (f_1(\xi)) \right) + \left(\frac{1}{2} E \xi - \frac{M^2}{4\xi} + Z_1 - \frac{1}{4} F \xi^2 \right) f_1(\xi) = 0 \quad (20) \right.$$

$$\left. \frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{d}{d\eta} (f_2(\eta)) \right) + \left(\frac{1}{2} E \eta - \frac{M^2}{4\eta} + Z_2 + \frac{1}{4} F \eta^2 \right) f_2(\eta) = 0 \quad (21) \right.$$

avec $Z_1 + Z_2 = 1$

(Pour un atome hydrogénoïde de numéro atomique Z on aurait $Z_1 + Z_2 = Z$).

Z_1 et Z_2 sont appelées "constantes de séparation" et caractérisent les charges effectives vues par l'électron dans les mouvements en ξ et η . Le problème est donc séparé en ξ et η et la résolution des équations (20) et (21) est possible.

Les fonctions d'ondes solutions $\Psi_{E, Z_1, M}$ sont telles que

$$\left\{ \begin{array}{l} H_F \Psi_{E, Z_1, M} = E \Psi_{E, Z_1, M} \\ L_z \Psi_{E, Z_1, M} = \hbar M \Psi_{E, Z_1, M} \\ M_z \Psi_{E, Z_1, M} = e^2 (Z_2 - Z_1) \Psi_{E, Z_1, M} \end{array} \quad .$$

Dans un sous-espace de M fixé, le champ électrique lève la dégénérescence des niveaux de n fixé. Ceci donne alors naissance à un multiplet appelé "multiplet Stark".

Quand le champ électrique croît, les multiplets se mélangent, deux niveaux appartenant à des multiplets différents se "croisant". Ceci est une conséquence de la constante exacte du mouvement M_2 . Deux états de même énergie E mais de nombre quantique M ou Z_1 différents n'interagissant pas

$$(\Psi_{E,Z_1,M} | H | \Psi_{E',Z_1',M'}) = E \delta_{(E-E')} \delta_{Z_1,Z_1'} \delta_{M,M'} \quad [13] .$$

4. L'atome d'Hydrogène en champ magnétique.

Nous nous plaçons dans le cadre d'une étude non relativiste de l'atome d'Hydrogène perturbé par la présence d'un champ magnétique uniforme.

Pour simplifier, le noyau est supposé de masse infinie et placé à l'origine des coordonnées. Avec ces hypothèses et si l'on choisit d'utiliser la jauge cylindrique, l'Hamiltonien réduit $H_{R,c}$ s'écrit

$$H_B = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}|} - \frac{q}{2m} \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{q^2}{8m} (\vec{r} \times \vec{B})^2 \quad . \quad (22)$$

Les deux termes qui dépendent du champ \vec{B} (le terme paramagnétique linéaire et le terme diamagnétique quadratique) rompent la symétrie sphérique associée au potentiel coulombien. Seule subsiste la symétrie de révolution autour de l'axe Oz . La composante L_z du moment cinétique commute avec l'Hamiltonien H_B . On peut chercher les fonctions propres de H_B comme fonctions propres de L_z .

En coordonnées cylindriques, on peut donc poser

$$\Psi(\rho, z, \varphi) = \frac{e^{iM\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \chi(\rho, z)$$

où $M\hbar$ est valeur propre de L_z .

Nous avons ainsi séparé la partie dépendant de φ dans la fonction d'onde totale, comme nous l'avons fait dans le paragraphe précédent. L'équation de Schrödinger s'écrit alors dans le sous-espace M fixé

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \chi(\rho, z) \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \chi(\rho, z) \right] \\ + \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{M^2}{\rho^2} - \frac{e^2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + \frac{1}{8} q^2 B^2 \rho^2 \right] \chi(\rho, z) = \left(E + \frac{qB\hbar M}{2m} \right) \chi(\rho, z) \end{aligned} \quad (23)$$

Là encore le problème est devenu bidimensionnel et ne se sépare pas en coordonnées cylindriques.

Le terme paramagnétique linéaire en B , $+\frac{qB\hbar M}{2m}$ est le même dans tout sous-espace de nombre quantique magnétique M fixé et ne fait que déplacer globalement l'énergie du système. On peut donc s'intéresser uniquement à l'Hamiltonien diamagnétique H_D avec :

$$H_D = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{R}|} + \frac{q^2 B^2}{8m} \rho^2 \quad . \quad (24)$$

Pour poursuivre la résolution, on recherche d'autres propriétés de symétrie de l'Hamiltonien H_D : H_D est invariant pour les transformations d'inversion $\vec{R} \rightarrow -R$ et de réflexion $z \rightarrow -z$. Il en résulte que la parité totale Π_t et la parité suivant l'axe z , Π_z commutent avec l'Hamiltonien H_D .

Dans un sous-espace de M donné, Π_t et Π_z sont liées par la relation $\Pi_t = (-1)^M \Pi_z$ et ont pour valeurs propres ± 1 . Les fonctions d'ondes $\chi(\rho, z)$ solutions de l'équation (23) devront donc être paires ou impaires en z .

Ce résultat n'est pas suffisant pour pouvoir résoudre complètement l'équation () et l'on est conduit à chercher un analogue au vecteur de Runge Lenz généralisé, \vec{M} dans le cas de l'atome en champ magnétique.

Le vecteur de Runge Lenz ne commute pas avec l'Hamiltonien H_D mais, alors que dans le paragraphe précédent on a pu construire à partir de \vec{A} la nouvelle constante M_z , dans le cas présent un cheminement analogue ne donne aucun résultat. En effet, dans un traitement classique, les équations d'évolution de \vec{A} ne permettent pas ici de trouver une autre constante du mouvement. Ceci est lié au caractère polaire du champ magnétique, la force magnétique dépendant non seulement de l'intensité du champ \vec{B} mais aussi de la vitesse \vec{v} de l'électron. Quantiquement \vec{A} est un mauvais candidat pour la construction d'une constante du mouvement puisque chacune de ses composantes anticommute avec l'opérateur de parité Π_t et, comme nous le verrons plus tard, nous devons nous intéresser plutôt à des expressions quadratiques des composantes de \vec{A} . Malgré de nombreuses recherches, les symétries de l'atome d'Hydrogène, maintenant bien connues, n'ont pas permis de construire une symétrie supplémentaire exacte en présence de champ magnétique.

Le problème reste donc non séparable dans tous les systèmes de coordonnées spatiales habituellement utilisés, ou ceux associés à des symétries connues [17] et, à l'heure actuelle, aucune théorie ne permet de prédire le comportement de l'atome d'Hydrogène soumis à un champ magnétique \vec{B} d'intensité arbitraire.

A ce stade, les modèles développés ne peuvent être qu'approchés ; ils ont suggéré certains types particuliers de comportement, par exemple l'Hamiltonien classique semble devoir être associé à des mouvements à la fois "réguliers" et "irréguliers" se traduisant par des trajectoires dans l'espace des phases de caractéristiques très différentes et correspondant, d'un point de vue quantique, à des spectres d'énergie d'aspect ordonné et aléatoire [14]. Des "expériences numériques" ont confirmé cette prédiction [15].

Lorsque le champ est suffisamment peu intense pour qu'une méthode de perturbation soit applicable,

- d'un point de vue classique on peut définir un Hamiltonien moyen, associé à deux types de mouvements différents (libration et rotation),
- d'un point de vue quantique, le spectre d'énergie présente pour chaque multiplicité n une allure ordonnée. Si $\frac{|M|}{n}$ est suffisamment petit on distinguera deux types de comportement suivant que la variation de l'énergie associée à la perturbation est forte ou faible. Pour les états de faible énergie (libration), états pairs et impairs (Π_t) apparaîtront en première approximation sous la forme de doublet, alors que, pour les états de plus forte énergie (rotation), ces états alterneront de façon régulière. Si $\frac{|M|}{n}$ est suffisamment grand, alors seul subsistera le mouvement de rotation [16].

Signalons également qu'une étude numérique, consistant à diagonaliser l'Hamiltonien diamagnétique H_D (24) sur une base d'états très étendue (n variant entre 1 et 22) et pour différentes intensités du champ \vec{B} montre que des états suffisamment excités appartenant à des multiplicités différentes semblent se croiser (*) [19]. Or, comme nous l'avons déjà rappelé, dans l'étude de l'atome d'Hydrogène soumis à un champ électrique statique, l'apparition de croisements exacts de niveaux traduit l'existence d'une symétrie exacte associée à une constante du mouvement [13], A_z dans le cas cité. La mise en évidence dans le cas de l'effet diamagnétique d'anticroisements très étroits confirme l'absence de symétrie exacte mais suggère qu'il peut exister dans ce problème une symétrie approchée ; celle-ci ne pouvant être associée à des transformations dans l'espace des positions des particules est obligatoirement d'origine dynamique. Le problème qui se

* (Quand l'intensité B croît, deux niveaux issus de multiplicités correspondant en champ nul à des valeurs différentes du nombre quantique principal n peuvent avoir la même énergie pour une intensité B_0 donnée.

pose alors est de déterminer cette symétrie dynamique approchée et de définir dans quelles conditions elle peut être valable ; c'est l'une des préoccupations actuelles des théoriciens.

Conclusion.

Nous avons, dans ce premier chapitre, mis en évidence les difficultés posées par le problème de l'atome en présence de champ magnétique. Le second chapitre sera consacré à l'exposé des modèles approchés et de leur domaine de validité.

Chapitre II

MODELES THEORIQUESATOME D'HYDROGENE SOUMIS A UN CHAMP MAGNETIQUE UNIFORME

Dans le premier chapitre de ce mémoire, nous avons mis en évidence l'impossibilité de résoudre complètement le problème de l'atome d'Hydrogène en champ magnétique uniforme, impossibilité liée à la non-séparabilité de l'Hamiltonien. Dès lors, toutes les descriptions, qu'elles soient classiques ou quantiques, nous seront utiles pour aller plus avant dans la compréhension des phénomènes. Nous allons donc exposer dans les deux premiers paragraphes de ce chapitre, un ensemble de modèles plus ou moins approchés accompagnés de leurs conditions de validité. Dans le troisième paragraphe, nous donnerons les résultats théoriques particuliers s'appliquant aux états très excités de l'atome en champ magnétique.

I - Modèles Classiques.

Dans le paragraphe I du premier chapitre, nous avons mis en évidence le couplage entre le mouvement du centre de gravité et le mouvement de la particule réduite dans le cas du problème de deux corps chargés placés dans un champ magnétique. Nous y reviendrons dans le paragraphe II-1 de ce chapitre ; nous nous plaçons pour l'instant dans l'hypothèse simplificatrice de l'atome d'Hydrogène en considérant que le noyau est de masse infinie et qu'il est placé à l'origine des coordonnées.

1. Description classique à l'aide des potentiels.

A - Référentiel de Larmor.

L'électron de masse m et de vitesse \vec{v} est soumis à deux forces :

$$\begin{aligned} F_{\text{magnétique}} &= q \vec{v} \times \vec{B} \\ F_{\text{coulombienne}} &= -e^2 \frac{\vec{r}}{r^3} . \end{aligned}$$

Le principe fondamental de la dynamique s'écrit dans le référentiel du laboratoire :

$$m \vec{\gamma} = q \vec{v} \times \vec{B} - e^2 \frac{\vec{r}}{r^3} .$$

Dans le référentiel de Larmor (en mouvement de rotation uniforme autour de Oz à la pulsation

$$\omega_L = \frac{\omega_c}{2} = - \frac{qB}{2m} ,$$

la force de Coriolis compense la force de Lorentz et le principe fondamental s'écrit :

$$m \vec{\gamma}_L = \frac{q^2}{4m} \vec{B} \times (\vec{B} \times \vec{r}_L) - e^2 \frac{\vec{r}_L}{r_L^3} \quad (1)$$

où $\frac{q^2}{4m} \vec{B} \times (\vec{B} \times \vec{r}_L)$ est la force d'entraînement centrifuge,

\vec{r}_L désigne la position de la particule dans le repère de Larmor.

L'énergie totale E s'écrit :

$$E = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{e^2}{r} \quad \text{dans le référentiel du laboratoire} \quad (2)$$

$$\text{et } E = \frac{1}{2} m v_L^2 - \frac{e^2}{r_L} + \frac{q^2 B^2}{8m} \rho^2 - \frac{q \vec{B}}{2m} (\vec{r}_L \times m \vec{v}_L) \quad (3)$$

dans le référentiel de Larmor, où $\rho \equiv \rho_L$.

Le terme $-\frac{q \vec{B}}{2m} (\vec{r}_L \times m \vec{v}_L)$ peut s'écrire $+\frac{\vec{\omega}_c}{2} \cdot \vec{l}_L$ où \vec{l}_L est le moment cinétique dans le référentiel de Larmor. Ce terme représente l'énergie associée à la rotation du référentiel et se conserve séparément. En effet,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(-\frac{q \vec{B}}{2m} (\vec{r}_L \times m \vec{v}_L) \right) = \\ = -\frac{q \vec{B}}{2m} (\vec{v}_L \times m \vec{v}_L) + \frac{-q \vec{B}}{2m} \left(\vec{r}_L \times \left(\frac{q^2}{4m^2} \vec{B} \times (\vec{B} \times \vec{r}_L) - e^2 \frac{\vec{r}_L}{m r_L^3} \right) \right) = 0 \end{aligned}$$

On peut donc décrire le mouvement de l'électron dans le référentiel de Larmor par l'énergie cinétique $\frac{1}{2} m v_L^2$ et par l'énergie potentielle $V = -\frac{e^2}{r_L} + \frac{1}{2} m \omega_L^2 \rho^2$ en sachant que l'énergie totale comprend un terme supplémentaire $\frac{\vec{\omega}_c}{2} \cdot \vec{l}_L$.

Remarque : Ce dernier terme rend compte du caractère axial du champ magnétique, caractère qui est complètement absent dans le potentiel V_L .

B - Etude du potentiel V .

En coordonnées (ρ, z) et en unités atomiques le potentiel s'écrit :

$$V(\rho, z) = \frac{\gamma^2}{8} \rho^2 - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} \quad \text{avec } \gamma = \frac{B}{B_c} \quad (4)$$

Les longueurs sont exprimées en unités a_0 (rayon de Bohr) et les énergies en Hartree.

Les Figures II.1, a, b, c représentent des coupes de la surface $V(\rho, z)$ par des plans respectivement à V , ρ et z constants.

Les courbes ont été tracées pour un champ magnétique de 10 T.

La Fig. II.1.a représente les équipotentiellles $V(\rho, z) = E$ pour différentes valeurs de E . Elles définissent les zones où $(E - V)$ est positif, c'est-à-dire les régions (ρ, z) classiquement accessibles à l'électron.

Pour $E = -3,5 \cdot 10^{-3}$ u.a., l'équipotentielle est presque un cercle ; le mouvement, dominé par le potentiel coulombien est peu modifié par le terme diamagnétique $\frac{\gamma^2 \rho^2}{8}$.

Pour $-3,5 \cdot 10^{-3}$ u.a. $< E < 0$, la courbe s'aplatit dans la direction ρ , mais le domaine accessible à l'électron reste borné ; celui-ci est donc toujours lié.

A partir de $E = 0$, le domaine n'est plus borné ; il existe une voie d'ionisation possible dans la direction $\pm z$.

Pour $E = +2,5 \cdot 10^{-3}$ u.a., l'équipotentielle tend vers deux droites $\rho = \text{cte}$ et le mouvement est dominé par le terme diamagnétique (zone de Landau).

La Figure II.1.b représente les courbes $E = V(\rho, z_0)$ pour différentes valeurs de z_0 . Le terme $\frac{\gamma^2 \rho^2}{8}$ borne le mouvement dans la direction ρ , l'atome ne peut s'ioniser que dans la direction z , par le canal que visualise la figure. Nous verrons comment utiliser cette représentation pour l'interprétation des seuils d'ionisation (Chapitre IV).

Nous reviendrons sur la courbe $E = V(\rho, z_0=0)$ qui joue un rôle important dans l'approximation adiabatique, certains états bien particuliers étant localisés dans le plan $z=0$ [20]. L'existence de ces états permet d'expliquer la période en énergie de $\frac{3}{2} \hbar \omega_c$ observée au voisinage de $E=0$ dans les spectres de Garton et Tomkins [21] (cf. Chapitre IV).

La Figure II.1.c représente les courbes $E = V(\rho_0, z)$ pour différentes valeurs de ρ_0 . Pour $\rho_0=0$, le potentiel devient un potentiel coulombien à une dimension $-\frac{1}{|z|}$. Nous utiliserons ces courbes quand nous étudierons l'approximation adiabatique dans le paragraphe III-1-E.

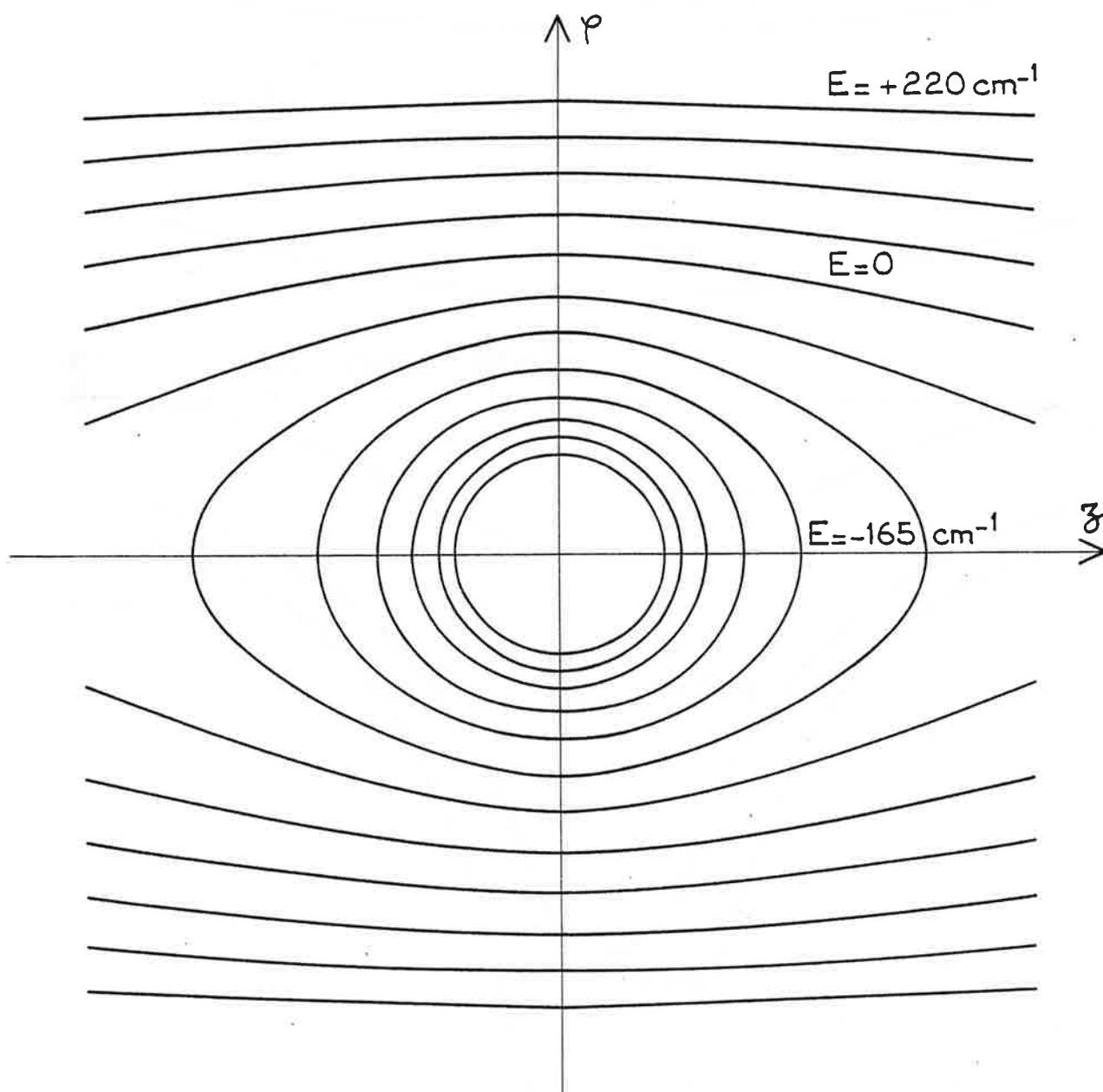


Figure II.1.a : Equipotentielles $V(\rho, z) = E$ pour différentes valeurs de E (négatives, nulles et positives). L'écart entre deux valeurs de E consécutives est $55 \text{ cm}^{-1} \approx 0,5 \cdot 10^{-3} \text{ u.a.}$.
(La valeur du champ magnétique est $B = 10 \text{ T}$).

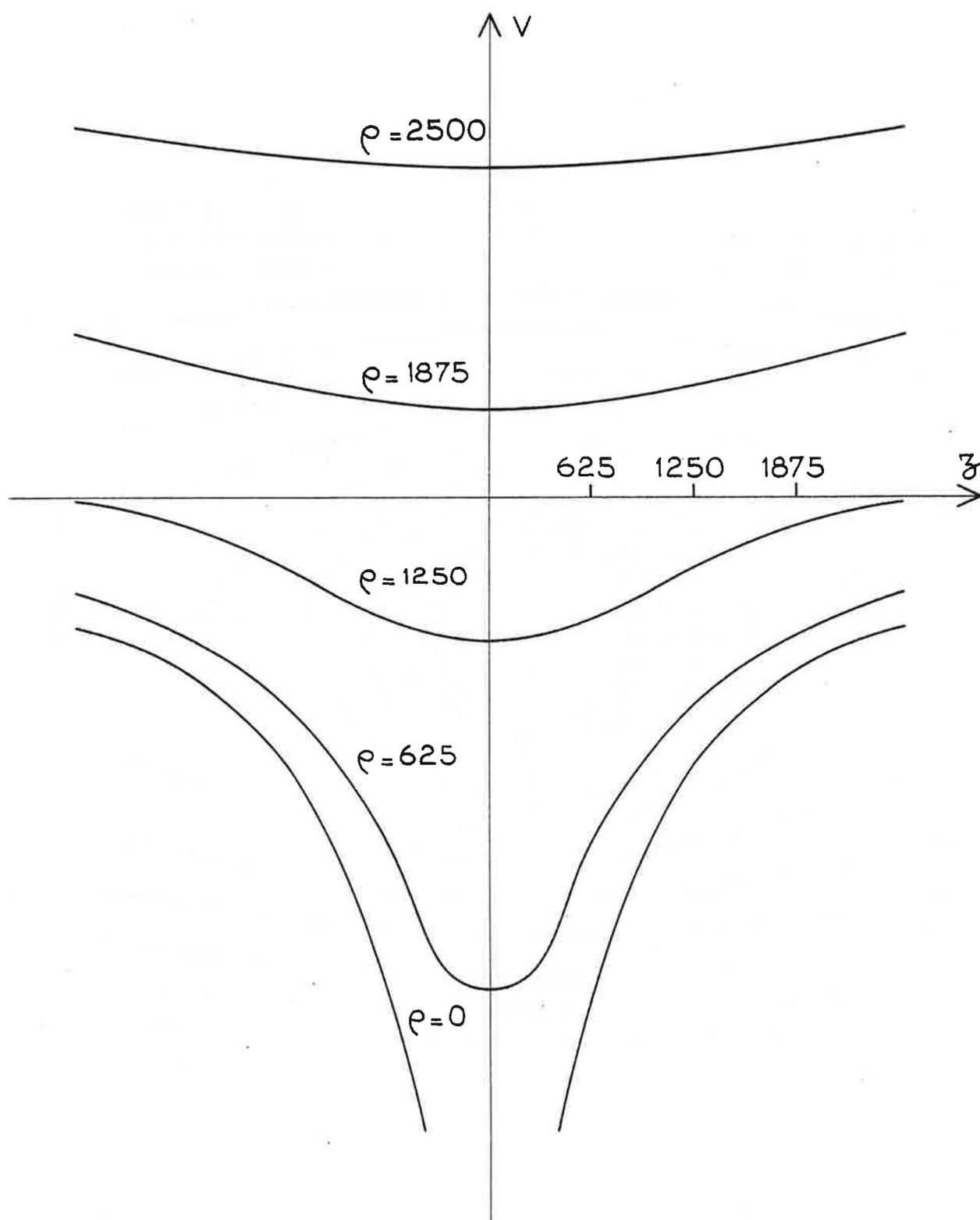


Figure II.1.b : Courbes intersections de la surface de $E = (\rho, z)$ par des plans à z constant (z et ρ sont exprimés en u.a.) ($B = 10$ T).

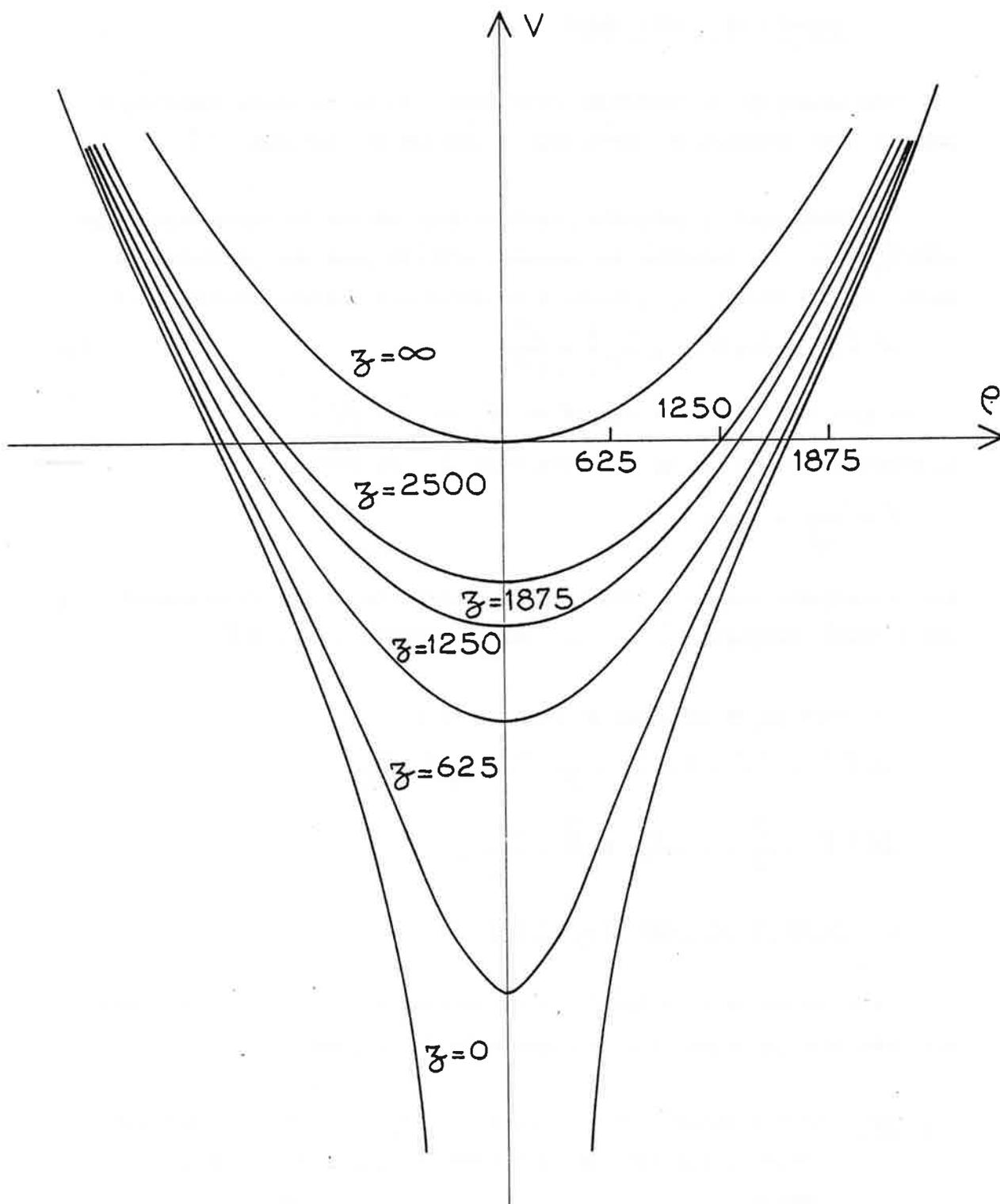


Figure II.1.c : Courbes intersections de la surface de $E = V(\rho, z)$ par des plans à ρ constant (z et ρ sont exprimés en u.a.) ($B = 10 \text{ T}$).

2. Description classique Lagrangienne et Hamiltonienne.

A - Lagrangien, Hamiltonien.

Les équations du mouvement décrivant l'atome en champ magnétique peuvent être déduites du formalisme classique de Lagrange [1] .

\vec{A}_e désignant le potentiel vecteur dont dérive le champ magnétique ($\text{rot}.\vec{A}_e = \vec{B}$) , la fonction de Lagrange s'écrit pour une particule de masse m , de charge q soumise à un potentiel central coulombien :

$$\mathcal{L}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^2 + q \vec{A}_e \cdot \dot{\vec{r}} + \frac{e^2}{|\vec{r}|} \quad (5)$$

est une fonction des 6 variables \vec{r} et $\dot{\vec{r}} = \frac{d}{dt} \vec{r}$.

Le moment conjugué \vec{p} de la coordonnée \vec{r} est défini par

$$\vec{p} = \frac{\partial}{\partial \dot{\vec{r}}} = m \dot{\vec{r}} + q \vec{A}_e \quad (6)$$

Nous remarquons que la présence de \vec{A}_e entraîne la non équivalence entre moment conjugué \vec{p} et quantité de mouvement $\vec{\pi} = m \dot{\vec{r}}$.

La fonction de Hamilton s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}) &= \vec{p} \cdot \dot{\vec{r}} - \mathcal{L}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q \vec{A}_e)^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}|} \\ \mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}) &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{m} \vec{p} \cdot \vec{A}_e + \frac{q^2 \vec{A}_e^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}|} \end{aligned}$$

B - Choix de la jauge cylindrique.

De ce choix va dépendre la forme effective de l'Hamiltonien, mais les résultats physiques sont indépendants de la jauge.

Remarque : L'Hamiltonien peut s'écrire $= \frac{1}{2m} \vec{\pi}^2 - \frac{e^2}{r}$ montrant que c'est la quantité de mouvement $\vec{\pi}$ qui a seule une réalité physique.

La symétrie cylindrique que nous avons déjà mise en évidence nous conduit naturellement à choisir la jauge dite cylindrique :

$$\vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r}) \quad . \quad (7)$$

L'Hamiltonien prend la forme

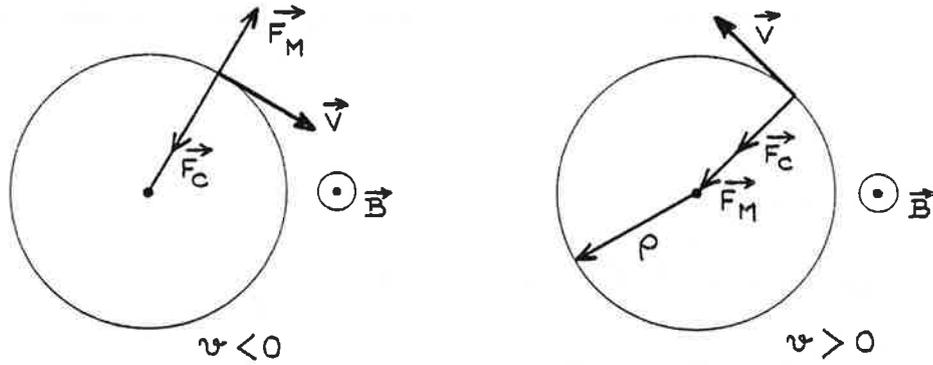
$$\begin{aligned} &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{m} \vec{p} \cdot \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r}) + \frac{q^2}{2m} \left[\frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r}) \right]^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}|} \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{2m} \vec{\ell} \cdot \vec{B} + \frac{q^2}{8m} B^2 \rho^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}|} \end{aligned}$$

faisant apparaître le moment cinétique $\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p}$, un terme linéaire en champ dit "paramagnétique" $-\frac{q}{2m} B \ell_z$, et un terme quadratique en champ dit "diamagnétique" $\frac{q^2}{2m} B^2 \rho^2$. Ces deux termes ont une symétrie cylindrique évidente et le caractère polaire du champ magnétique n'intervient que dans le terme paramagnétique.

3. Modèle semi-classique. Quantification de l'action.

Dans ce paragraphe nous allons développer un modèle très simplifié qui permettra de rappeler des résultats connus mais essentiels (modèle de Bohr, modèle de Landau) et aussi de comparer l'importance relative des termes d'énergie magnétique et coulombienne afin de mettre en évidence l'existence de différents régimes, ceux-ci pouvant être représentés par des zones différentes dans le plan (énergie E , champ B) [22].

Supposons que sous l'action des forces magnétique et coulombienne l'électron suive une trajectoire circulaire de rayon ρ constant, située dans le plan perpendiculaire à la direction de \vec{B} et centrée sur l'origine. Cette trajectoire est parcourue d'un mouvement circulaire uniforme avec la vitesse angulaire $\dot{\theta}$:



La projection sur l'axe radial de l'équation fondamentale de la dynamique s'écrit :

$$\frac{m v^2}{\rho} = -q v B + Z \frac{e^2}{\rho^2} \quad (8)$$

v est positif si le sens de rotation de l'électron est le sens positif rapporté à la direction de \vec{B} (Oz) et négatif dans l'autre cas. Le Lagrangien associé au mouvement de l'électron s'écrit alors :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m v^2 + \frac{q v \rho B}{2} + Z \frac{e^2}{\rho} .$$

Pour le mouvement circulaire la vitesse est $v = \rho \dot{\theta}$.

Le moment conjugué de ρ est nul : $p_\rho = 0$.

Le moment conjugué de θ , p_θ , permet la quantification de l'action sur une période du mouvement

$$\oint p_\theta d\theta = nh \quad \text{avec} \quad p_\theta = m \rho^2 \dot{\theta} + \frac{q \rho^2 B}{2}$$

soit : $m \rho v + \frac{q \rho^2 B}{2} = nh$. (9)

L'énergie est donnée par

$$E = \frac{1}{2} m v^2 - Z \frac{e^2}{\rho} . \quad (10)$$

En éliminant la variable v les équations (8) et (9) donnent ρ comme solution d'une équation du quatrième degré [23, 24]

$$\frac{1}{4} \left(\frac{\rho}{a_c}\right)^4 + \left(\frac{\rho}{a_0}\right) Z = n^2 \quad (11)$$

où a_0 et a_c sont respectivement le rayon de Bohr et le rayon cyclotron de l'électron

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} \quad a_c = \sqrt{\frac{\hbar}{qB}} \quad . \quad (12)$$

La quantification de l'énergie est obtenue à partir des équations (9) et (10), la valeur de ρ étant déterminée par l'équation (11).

L'équation (10) devient alors :

$$E = -\frac{1}{2} Z - \frac{qB}{2m} n\hbar + \frac{q^2 \rho^2 B^2}{4m} \quad (13)$$

$$\text{soit : } E = \hbar\omega_c \left(\frac{1}{2} n + \frac{\rho^2}{4a_c^2} - \frac{Za_c^2}{2\rho a_0} \right) \quad .$$

Dans le cas extrême $B=0$, l'équation (11) se ramène à la quantification de Bohr

$$\rho_B = n^2 a_0 / Z \quad .$$

Dans l'autre cas extrême où le terme coulombien est nul ($Z=0$) on retrouve la quantification de Landau [25]

$$\rho_c = \sqrt{2n} a_c \quad .$$

On peut également étudier le comportement au voisinage de $E=0$. En éliminant v entre les équations (8) et (9) on obtient le rayon de la trajectoire

$$\rho_0 = \left(\frac{m Z}{8\pi\epsilon_0 B^2} \right)^{1/3} \quad . \quad (14)$$

La quantification de l'énergie (Eq. ()) permet de déduire la valeur n_0 de n caractérisant la résonance située au voisinage de $E=0$

$$n_0 = \left(Z^2 \frac{B_c}{B} \right)^{1/3} \frac{3}{2^{5/3}} \quad (15)$$

soit, dans l'Hydrogène : $B n_0^3 = 0,844 B_c$.

Au voisinage de la limite d'ionisation on peut calculer à partir des équations (11) et (13) les dérivées $\left(\frac{d\rho}{dn}\right)_0$ et $\left(\frac{dE}{dn}\right)_0$. L'écart entre

deux résonances au voisinage de la limite d'ionisation et pour un champ fixe a pour expression :

$$\left(\frac{dE}{dn}\right)_0 = 2\pi\omega_c \quad (16)$$

Dans tous les cas étudiés le nombre quantique n traduit la quantification selon la variable θ (Eq. (9)) ; la valeur limite de n , en champ faible, correspond au nombre quantique principal de l'atome isolé et, en champ fort, à celui caractérisant les états de Landau.

Dans le Tableau I, nous rappelons les résultats obtenus dans le modèle circulaire simple et correspondant aux deux situations extrêmes : modèles de Bohr (cas noté B) et Landau (noté C) respectivement. Pour une orbite circulaire de nombre quantique n nous précisons successivement :

- ρ le rayon de l'orbite,
- v la vitesse de l'électron,
- E l'énergie totale de l'électron,
- Ω_B ou ω_C la vitesse angulaire de rotation de l'électron,
- F_{Coul} l'intensité de la force coulombienne - cas B ,
- F_{Mag} l'intensité de la force magnétique - cas C .

- Dans le modèle de Bohr, la présence d'un faible champ magnétique entraîne l'existence de la force magnétique de module ($q < 0$)

$$F_{\text{Mag}} = -q v_B B = -q B \cdot \frac{e^2}{n\hbar} Z \quad .$$

Elle reste négligeable devant la force de Coulomb si :

$$F_{\text{Mag}} \ll F_{\text{Coul}}$$

$$\text{soit : } -q B \frac{e^2 Z}{n\hbar} \ll \frac{e^2 Z^3}{n^4 a_0^2}$$

$$\text{soit : } \frac{B n^3}{B_c Z^2} \ll 1 \quad \text{avec} \quad B_c = \frac{-m^2 q^3}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3} = 2,35053 \cdot 10^5 \text{ T} \quad ;$$

en posant $\gamma = \frac{B}{B_c} = \left(\frac{a_0}{a_c}\right)^2$ on obtient

$$\boxed{\gamma n^3 \ll Z^2} \quad .$$

(17)

- De même, dans le modèle de Landau, une perturbation coulombienne entraîne l'existence d'une force

$$F_{\text{Coul}} = \frac{Z e^2}{\rho_c^2} = \frac{e^2 Z}{2n a_c^2} .$$

La condition $F_{\text{Coul}} \ll F_{\text{Mag}}$ est vérifiée si

$$\frac{Z e^2}{2n a_c^2} \ll \sqrt{2n} m \omega_c^2 a_c$$

soit :

$$\frac{B(2n)^3}{B_c} \gg Z^2 \quad \text{ou} \quad 8\gamma n^3 \gg Z^2 ,$$

soit approximativement :

$$\boxed{\gamma n^3 \gg Z^2} . \quad (18)$$

Bohr		Landau	
$\rho_B = n^2 a_0 / Z$	$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2}$	$\rho_c = \sqrt{2n} a_c$	$a_c = \sqrt{\frac{-\hbar}{qB}}$
$v_B = \frac{e^2 Z}{n\hbar}$		$v_c = \sqrt{2n} a_c \omega_c$	$\omega_c = \frac{-qB}{m}$
$E_B = \frac{-E_I}{n^2} Z^2$	$E_I = \frac{m e^4}{2\hbar^2}$	$E_c = n \hbar \omega_c$	
$\hbar \Omega_B = \frac{2E_I}{n^3}$		$\hbar \omega_c = \frac{-qB\hbar}{m}$	
$F_{\text{Coul}} = \frac{Z e^2}{\rho_B^2} = \frac{e^2 Z^3}{n 4a_0^2}$		$F_{\text{Mag}} = -q v_c B = \sqrt{2n} m \omega_c^2 a_c$	

Tableau I

Dans le cas de l'Hydrogène, la condition $\gamma n^3 \ll 1$ (resp. $\gamma n^3 \gg 1$) définit un domaine dans le diagramme (énergie, champ magnétique) et le nombre n garde alors sa signification associée au modèle de Bohr (resp. de Landau) dans ce domaine. A l'extérieur de ces deux zones (E, B), n ne peut être considéré que comme résultat d'une quantification où termes magnétique et coulombien ont chacun leur importance. En particulier, à énergie nulle, les forces magnétique et coulombienne sont du même ordre de grandeur et on peut, à champ B fixé, trouver le nombre n correspondant aux états d'énergie voisine de $E=0$ [7, 26].

Il vérifie :

$$B n^3 = 1,56 B_c$$

En conclusion, ce modèle simple nous a permis de définir un certain nombre de paramètres caractéristiques du problème (rayon, fréquence, etc..) et d'introduire le terme γn^3 qui évalue l'importance relative des forces coulombienne et magnétique. Cependant il ne faut pas perdre de vue les limites de ce modèle :

- La vitesse de l'électron et le rayon de son orbite, donc les forces mises en jeu sont de module constant sur la trajectoire circulaire. Or, dans le cas réel, le rapport F_{Mag}/F_{Coul} varie suivant le point de la trajectoire considéré.
- Le mouvement s'effectue dans le plan perpendiculaire au champ magnétique, ainsi le mouvement suivant l'axe Oz est totalement absent.
- Ce type d'état classique, mouvement circulaire uniforme dans un plan perpendiculaire à \vec{B} , ne peut correspondre qu'à des états de moment cinétique élevé.

Après avoir exposé cette première quantification semi-classique qui nous a livré quelques résultats qualitatifs, il est nécessaire d'aborder le problème dans le cadre de la mécanique quantique ; c'est l'objet du paragraphe II de ce chapitre.

II - Approche quantique.

Nous nous plaçons maintenant dans le cadre de la mécanique quantique.

Les problèmes des niveaux de Landau (électron libre soumis à un champ magnétique) et de l'atome d'Hydrogène (électron soumis à un potentiel coulombien) que nous avons déjà évoqués dans le cadre d'une approche classique (paragraphe précédent) possèdent une résolution quantique exacte. Dans un premier paragraphe, nous allons revenir sur ces deux cas particulièrement importants puisqu'ils constituent les deux situations extrêmes où l'un des deux potentiels, magnétique ou coulombien, est nul.

Dans le deuxième paragraphe, nous écrirons l'Hamiltonien à deux corps en présence d'un champ magnétique et nous en interpréterons chacun des termes. Puis nous traiterons le plus complètement possible l'Hamiltonien réduit dans le troisième paragraphe.

1. Deux cas extrêmes résolus.

A - Atome hydrogénoïde : électron soumis au potentiel coulombien.

α - Hamiltonien.

On considère le système électron-noyau dans un traitement non relativiste ; l'Hamiltonien s'écrit, pour un noyau de numéro atomique Z :

$$H = \frac{\vec{P}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{P}_2^2}{2m_2} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} ,$$

l'indice 1 est relatif au noyau (proton), l'indice 2 à l'électron.

La séparation du mouvement relatif et du mouvement du centre de masse est possible. L'opérateur $\vec{P}_G = \vec{P}_1 + \vec{P}_2$ commute avec l'Hamiltonien total que l'on peut alors écrire :

$$H = \frac{\vec{P}_G^2}{2M} + \frac{\vec{P}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}|}$$

avec M la masse totale, \vec{P} l'impulsion, \vec{r} la coordonnée et μ la masse réduite.

L'Hamiltonien total se sépare donc en deux parties qui commutent $\frac{P_G^2}{2M}$ et $H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}|}$ (Hamiltonien réduit). La fonction d'onde est

alors de la forme :

$$\Psi(\vec{r}_g, \vec{r}) = e^{\frac{i \vec{p}_G \vec{r}_G}{\hbar}} \Phi(\vec{r})$$

\vec{p}_G valeur propre de \vec{P}_G et $\Phi(\vec{r})$ solution de l'équation d'état

$$H_0 \Phi(\vec{r}) = E \Phi(\vec{r}) \quad \text{avec} \quad E_{TOT} = E + \frac{p_G^2}{2M} .$$

L'étude de H_0 et de ses symétries a déjà été rappelée dans le paragraphe II au premier chapitre.

β - Résolution.

La résolution en coordonnées sphériques est liée à l'invariance par transformation de symétrie sphérique de l'Hamiltonien et donc à l'existence de l'ECOC (H, L^2, L_z) . Les fonctions d'onde s'écrivent alors sous la forme

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} R_{n\ell}(r) Y_{\ell M}(\theta, \varphi)$$

où $Y_{\ell M}(\theta, \varphi)$ désignent les harmoniques sphériques, fonctions propres des opérateurs L^2 et L_z avec les valeurs propres $\ell(\ell+1) \hbar^2$ et $M\hbar$ et $R_{n\ell}(r)$ sont les fonctions d'onde radiales [2] possédant $(n-\ell-1)$ noeuds dans l'intervalle $]0, \infty[$ pour des états d'énergie $E < 0$. L'énergie d'un état lié ($E < 0$) s'écrit pour l'Hydrogène $E = -\frac{Z^2}{2n^2}$, chaque niveau d'énergie est donc dégénéré n^2 fois si on ne tient pas compte du spin de l'électron. En effet $0 \leq \ell \leq n-1$ et $|M| \leq \ell$. On désigne par n_r le nombre quantique radial défini par

$$n = n_r + \ell + 1$$

n_r est donc égal au nombre de noeuds de la fonction radiale $R_{n\ell}(r)$ dans l'intervalle $]0, +\infty[$. Pour une énergie positive, le spectre radial est continu, toutes les valeurs de ℓ et M étant possibles.

L'existence de l'ECCO (H, L_z, A_z) conduit à la résolution en coordonnées paraboliques (ξ, η, φ) (cf. II, premier chapitre).

La fonction d'onde est de la forme :

$$\Psi(\xi, \eta, \varphi) = f_1(\xi) f_2(\eta) \frac{e^{iM\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

où $f_1(\xi)$ est solution de

$$\frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{d}{d\xi} f_1(\xi) \right) + \left(\frac{1}{2} E \xi - \frac{M^2}{4\xi} + Z_1 \right) f_1(\xi) = 0$$

et $f_2(\eta)$ solution d'une équation analogue en η , Z_1 étant remplacé par Z_2 . Z_1 et Z_2 sont les constantes de séparation vérifiant $Z_1 + Z_2 = Z$.

L'étude des énergies potentielles effectives associées aux mouvements suivant ξ et η montre que l'on pourra trouver des états liés si $0 < Z_1$ et $Z_2 < Z$. Dans ce cas l'énergie totale sera obligatoirement négative. La quantification des deux mouvements suivant ξ et η introduit alors les deux nombres quantiques paraboliques n_1 et n_2 représentant respectivement le nombre de noeuds des fonctions $f_1(\xi)$ et $f_2(\eta)$ dans l'intervalle $]0, +\infty[$. L'énergie totale est alors égale à $E = \frac{-Z^2}{2n^2}$ où $n = n_1 + n_2 + |M| + 1$. (19)

La fonction d'onde $\Psi_{n_1, n_2, M}$ est vecteur propre de L_z avec la valeur propre $M\hbar$ et de A_z avec la valeur propre $[4, 27]$:

$$\frac{n_2 - n_1}{n} \times Z e^2 \quad (20)$$

γ - La représentation (\vec{J}_1, \vec{J}_2) .

Pour une valeur donnée négative de l'énergie E_0 , on peut définir par un changement d'échelle un nouvel opérateur, "opérateur de Lenz réduit en énergie", à partir du vecteur de Runge-Lenz quantique \vec{A} , et de l'Hamiltonien H_0 [10] (voir Relation de commutation §.I.14).

$$\vec{a} = \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{-2H_0}} \vec{A} \quad (21)$$

Celui-ci vérifie $\vec{a} \cdot \vec{L} = \vec{L} \cdot \vec{a} = 0$. L'Hamiltonien H_0 s'écrit alors

$$H_0 = \frac{-m Z^2 e^4}{2(a^2 + L^2 + \hbar^2)} .$$

Dans le sous-espace correspondant à une valeur fixée de l'énergie E_0 ($E_0 < 0$) on peut construire les deux opérateurs hermitiques :

$$\begin{cases} \vec{J}_1 = \frac{1}{2} (\vec{L} + \vec{a}) \\ \vec{J}_2 = \frac{1}{2} (\vec{L} - \vec{a}) \end{cases} \quad (22)$$

qui satisfont les relations de commutations suivantes :

$$\begin{cases} [J_{1i}, J_{1j}] = i \epsilon_{ijk} \hbar J_{1k} \\ [J_{2i}, J_{2j}] = i \epsilon_{ijk} \hbar J_{2k} \\ [J_{1i}, J_{2j}] = 0 \end{cases} . \quad (23)$$

Ce sont celles de deux moments cinétiques qui commutent et qui ont même norme : les valeurs propres des opérateurs, \vec{J}_1^2 et \vec{J}_2^2 , sont notées

$$J^2 = J_1^2 = J_2^2 = \frac{1}{4} (L^2 + a^2) = \hbar^2 j(j+1)$$

où j peut prendre les valeurs $0, 1/2, 1, 3/2, \dots, 4$.

L'ECOC $(J_1^2 = J_2^2, J_{1z}, J_{2z})$ dont les vecteurs de base sont notés $|J, M_1, M_2\rangle$, commute avec H_0 et on a la relation :

$$\vec{a}^2 + \vec{L}^2 + \hbar^2 = \hbar^2 [4j(j+1) + 1] = \hbar^2 (2j+1)^2 . \quad (24)$$

Il en résulte que

$$H_0 |J, M_1, M_2\rangle = \frac{-m Z^2 e^4}{2\pi^2 (2j+1)^2} |J, M_1, M_2\rangle = \frac{-Z^2 E_I}{(2j+1)^2} |J, M_1, M_2\rangle$$

$(2j+1)$ peut donc être identifié au nombre quantique principal n .

De plus, puisque $\vec{L} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$:

$$L_z |J, M_1, M_2\rangle = (M_1 + M_2) \hbar |J, M_1, M_2\rangle ,$$

ce qui permet de retrouver que pour valeur $2j = n-1$, l varie de $0 \leq l \leq 2j$. Enfin, puisque $\vec{a} = \vec{J}_1 - \vec{J}_2$

$$a_z |J, M_1, M_2\rangle = (M_1 - M_2) \hbar |J, M_1, M_2\rangle \quad (25)$$

Il en résulte que :

$$A_z |J, M_1, M_2\rangle = Z e^2 \frac{M_1 - M_2}{n} |J, M_1, M_2\rangle .$$

On retrouve l'expression (Eq.(20)) donnant les valeurs propres de A_z en fonction des nombres quantiques paraboliques n_1 , n_2 et n .

Dans chacun des sous-espaces d'énergie fixée, $n = 2j+1$ les nombres quantiques M_1 et M_2 peuvent prendre chacun $2j+1$ valeurs $|M_i| \leq j$, $i = 1$ et 2 . On retrouve donc la dégénérescence n^2 des niveaux d'une multiplicité n donnée [10].

Pour décrire les n^2 états d'une multiplicité donnée, on peut choisir la représentation $(\vec{J}_1^2 = \vec{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z})$ ce qui est équivalent au choix de la représentation $(\vec{J}_1^2 = \vec{J}_2^2, L_z, A_z)$; c'est la représentation en coordonnées paraboliques décrite précédemment. Une autre représentation équivalente est donnée par $(\vec{J}_1^2 = \vec{J}_2^2, (\vec{J}_1 + \vec{J}_2)^2 = \vec{L}^2, \vec{J}_{1z} + \vec{J}_{2z} = L_z)$ et correspond aux coordonnées sphériques. Les vecteurs \vec{J}_1 et \vec{J}_2 étant des moments cinétiques qui commutent le passage des états d'une représentation à ceux de l'autre représentation fait appel à l'algèbre de Racah [28] et fait apparaître dans les formules de changement de base des coefficients 3-j (Clebsch-Gordon) [9].

Notons enfin que dans une multiplicité n donnée (couche n choisie) l'opérateur position \vec{r} peut être identifié aux opérateurs

$$\vec{r} \rightarrow \frac{-3}{2} \frac{\hbar^2}{m e^4} \frac{n^2}{Z^2} \vec{A} \equiv \frac{-3}{2} \frac{\hbar}{m e^2} \times \frac{n}{Z^2} \vec{a} ,$$

ces trois opérateurs ayant des éléments de matrice égaux.

On peut remarquer que, dans la séquence isoélectronique de l'Hydrogène, \vec{A} varie comme Z ; par conséquent on retrouve le résultat connu : \vec{r} varie comme $1/Z$. Remarquons que la représentation de r^2 n'est pas égale au carré de l'expression ci-dessus. En effet

$$r^2 \rightarrow n^2 \left(\frac{3}{2} a^2 + n^2 + 2 \right) \quad \text{quand} \quad Z=1 \quad [78] .$$

8 - Symétrie et théorie des groupes.

Dans le problème de l'atome d'Hydrogène isolé il est possible de construire les états appartenant à une multiplicité donnée n à partir des deux moments angulaires indépendants \vec{J}_1 et \vec{J}_2 vérifiant $\vec{J}_1^2 = \vec{J}_2^2 = \hbar^2 j(j+1)$ et $2j+1 = n$. Ces deux moments angulaires sont les générateurs de deux groupes $SU(2)$. Le produit de Kronecker $SO(4) = SU(2) \times SU(2)$ permet de définir le groupe de rotation $SO(4)$ dans un espace à quatre dimensions ; l'ensemble des états dégénérés de l'atome d'Hydrogène (n fixé et $0 \leq l \leq n-1$) forme une représentation irréductible de $SO(4)$ notée $(n-1,0)$. Ce groupe $SO(4)$ possède six générateurs qui sont les composantes du moment cinétique \vec{L} et du vecteur de Runge-Lenz réduit en énergie \vec{a} . De plus le problème possédant des propriétés dans les transformations de réflexion, le groupe de symétrie caractéristique du problème est le groupe $O(4)$ [28, 29]. Enfin, comme cela est montré dans le paragraphe précédent (§.γ.), symétrie $O(4)$ et dégénérescence accidentelle des niveaux de l'Hydrogène sont étroitement liées.

B - Les niveaux de Landau.

α - Hamiltonien.

On considère le problème non relativiste de l'électron soumis à un champ magnétique uniforme \vec{B} dirigé suivant Oz .

L'Hamiltonien est

$$H = \frac{(\vec{P} - q \vec{A}_e)^2}{2m} = \frac{\vec{\pi}^2}{2m}$$

où \vec{P} est l'impulsion de l'électron, différente de sa quantité de mouvement $\vec{\pi}$;

\vec{A}_e est le potentiel vecteur dont dérive le champ magnétique \vec{B}

$$\vec{\nabla} \times \vec{A}_e = \vec{B} .$$

Nous choisissons la jauge cylindrique pour \vec{A}_e , les résultats physiques étant de toute façon indépendants de ce choix. \vec{A}_e s'écrit alors :

$$\vec{A}_e = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r}) .$$

L'Hamiltonien devient

$$H_L = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{q}{2m} \vec{L} \cdot \vec{B} + \frac{q^2}{8m} (\vec{B} \times \vec{r})^2$$

β - Résolution.

P_z et L_z commutent avec l'Hamiltonien H_L ; on peut donc utiliser le système de coordonnées cylindriques (z, φ, ρ) et chercher les fonctions d'onde du sous-espace M fixé sous la forme

$$\Psi(z, \varphi, \rho) = \frac{e^{iP_z \frac{z}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{e^{iM\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \Phi(\rho) .$$

De plus, l'Hamiltonien H peut être décomposé en deux parties qui commutent :

$$H = H_{\parallel} + H_{\perp}$$

avec $H_{\parallel} = \frac{P_z^2}{2m}$

et $H_{\perp} = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m} - \frac{q}{2m} \vec{L} \cdot \vec{B} + \frac{q^2}{8m} (\vec{B} \times \vec{r})^2 .$ (26)

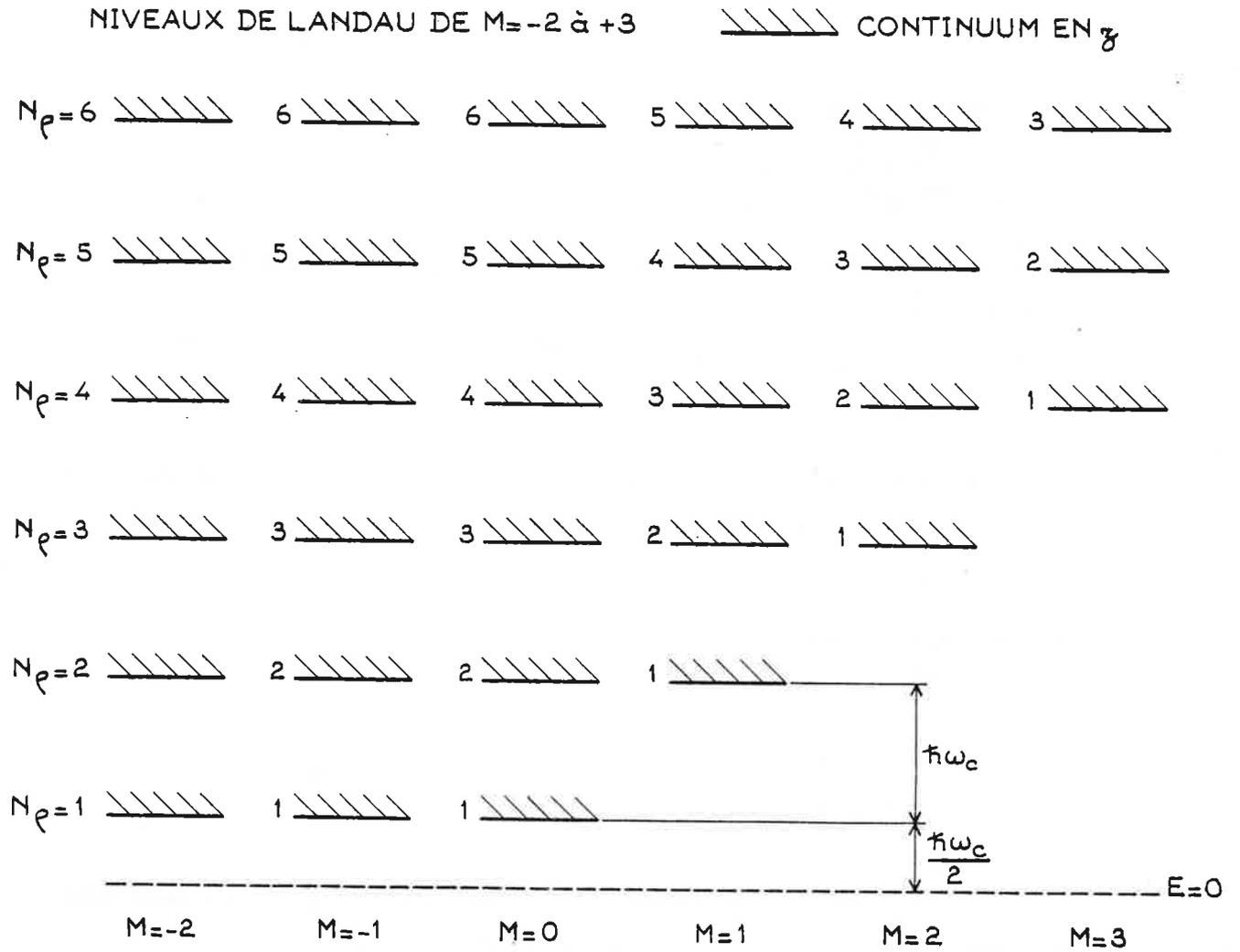


Figure II.4 : Niveaux de Landau.

Le mouvement de l'électron suivant z est donc celui d'une particule libre et l'énergie s'écrit :

$$E = E_1 + \frac{P_z^2}{2m}$$

avec
$$H_{\perp} \frac{e^{iM\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \Phi(\rho) = E_1 \frac{e^{iM\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \Phi(\rho) ,$$

soit :
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left[\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \Phi(\rho) \right] + \left[\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{M^2}{\rho^2} - \frac{q B M \hbar}{2m} + \frac{q^2 B^2 \rho^2}{8m} \right] \Phi(\rho) = E_1 \Phi(\rho) .$$

Le spectre d'énergie E_1 est un spectre discret et les énergies sont toujours positives.

La quantification en énergie impose l'existence d'un nombre quantique entier positif n_{ρ} , égal au nombre de noeuds de la fonction d'onde radiale $\Phi(\rho)$. On obtient

$$E_1 = \left(n_{\rho} + \frac{|M| + M}{2} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c .$$

Pour M fixé le niveau fondamental a pour énergie $\frac{1}{2} \hbar \omega_c$ pour $M \leq 0$ et $\hbar \omega_c (M + \frac{1}{2})$ pour $M \geq 1$, d'où :

$$E = \left(n_{\rho} + \frac{|M| + M}{2} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + \frac{P_z^2}{2m} . \quad (27)$$

La représentation de ce spectre d'énergie est donnée Figure II.4.

Notons que à p_z et M fixés, l'écart entre deux niveaux est égal à $\hbar \omega_c$.

La fonction d'onde $\Phi(\rho)$ ne dépend que de n_{ρ} et de $|M|$ et s'exprime sous une forme analytique [7, 22].

2. L'Hamiltonien à deux corps. Réduction au centre de masse.

L'Hamiltonien total non relativiste du système atome électron (charge q , masse m_1) - noyau (charge $-q$, masse m_2), soumis à un champ magnétique \vec{B} dérivant du potentiel \vec{A}_e , s'écrit pour la jauge cylindrique :

$$H_T = \frac{\vec{\pi}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{\pi}_2^2}{2m_2} - \frac{e^2}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|}$$

où $\vec{\pi}_1$ et $\vec{\pi}_2$ sont les quantités de mouvement respectives de l'électron et du noyau

$$\vec{\pi}_1 = \vec{P}_1 - q \vec{A}_e(\vec{R}_1) = \vec{P}_1 - \frac{q}{2} (\vec{B} \times \vec{R}_1)$$

$$\vec{\pi}_2 = \vec{P}_2 + q \vec{A}_e(\vec{R}_2) = \vec{P}_2 + \frac{q}{2} (\vec{B} \times \vec{R}_2)$$

Il n'y a pas identité entre impulsion et quantité de mouvement mais on peut effectuer formellement une transformation analogue à celle de l'Hamiltonien de l'Hydrogène sans champ magnétique [7] en posant :

$$M \vec{R}_G = m_1 \vec{R}_1 + m_2 \vec{R}_2$$

$$\vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2$$

$$\vec{P}_G = \vec{P}_1 + \vec{P}_2$$

$$M \vec{P} = m_2 \vec{P}_1 - m_1 \vec{P}_2$$

$$\vec{\pi}_G = \vec{\pi}_1 + \vec{\pi}_2$$

$$M \vec{\pi} = m_2 \vec{\pi}_1 - m_1 \vec{\pi}_2$$

$$M = m_1 + m_2$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

L'Hamiltonien devient :

$$H_T = \frac{\vec{\pi}^2}{2\mu} + \frac{\vec{\pi}_G^2}{2M} - \frac{e^2}{|\vec{R}|}$$

avec

$$\begin{cases} \vec{\pi}_G = \vec{P}_G + \frac{q}{2} \vec{R} \times \vec{B} \\ \vec{\pi} = \vec{P} + \frac{q}{2} \vec{R}_G \times \vec{B} + \frac{q}{2} \frac{m_2 - m_1}{m_2 + m_1} \vec{R} \times \vec{B} \end{cases}$$

$\vec{\pi}_G$ ne commute pas avec l'Hamiltonien H_T et il est impossible de séparer le mouvement réduit du mouvement du centre de masse. Cependant, lors de l'analyse classique du premier chapitre, nous avons mis en évidence une constante du mouvement dont l'analogue quantique est :

$$\vec{C} = \vec{\pi}_G - q \vec{R} \times \vec{B} = \vec{P}_G - \frac{q}{2} \vec{R} \times \vec{B} \quad (28)$$

qui commute avec l'Hamiltonien H_L .

Les fonctions propres $\varphi(\vec{r}_g, \vec{r})$ de \vec{C} de valeurs propres \vec{c} sont

solutions de

$$\vec{c} \varphi(\vec{r}_g, \vec{r}) = \vec{c} \varphi(\vec{r}_g, \vec{r})$$

soit

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}_g} \varphi(\vec{r}_g, \vec{r}) = \frac{i}{\hbar} (\vec{c} + \frac{q}{2} \vec{r} \times \vec{B}) \varphi(\vec{r}_g, \vec{r}) .$$

On recherche donc les fonctions d'onde de l'Hamiltonien H_T sous la forme

$$\varphi(\vec{r}_g, \vec{r}) = \exp \frac{i}{\hbar} (\vec{c} + \frac{q}{2} \vec{r} \times \vec{B}) \cdot \vec{r}_g \Psi_{\vec{c}}(\vec{r}) .$$

L'existence de la constante du mouvement \vec{c} montre qu'il existe un couplage entre le mouvement relatif et le mouvement du centre de masse . En effet la présence simultanée de \vec{r} et \vec{r}_g dans le premier terme de l'équation ci-dessus montre qu'on ne peut factoriser la fonction d'onde totale $\varphi(\vec{r}_g, \vec{r})$ sous la forme du produit $f_1(\vec{r}_g) \cdot f_2(\vec{r})$. Cependant il est possible d'isoler dans la fonction totale la partie dépendant des coordonnées du centre de masse ; on peut ensuite étudier le mouvement relatif $\Psi_{\vec{c}}(\vec{r})$. Remarquons que la constante \vec{c} apparaît explicitement dans l'étude de ces deux mouvements . La recherche des fonctions propres de H_T se réduit à celle des fonctions $\Psi_{\vec{c}}(\vec{r})$, ne dépendant que des coordonnées réduites et solutions de l'Hamiltonien réduit $H_{R, \vec{c}}$ obtenu en introduisant la forme particulière de $\varphi(\vec{r}_g, \vec{r})$ dans l'équation de Schrödinger $H \varphi = E \varphi$

$$H_{R, \vec{c}} = \frac{\vec{c}^2}{2M} - \frac{q}{M} (\vec{c} \times \vec{B}) \cdot \vec{R} + \frac{\vec{P}^2}{2\mu} - \frac{q}{2} \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} \right) \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{q^2}{8\mu} (\vec{R} \times \vec{B})^2 - \frac{e^2}{|\vec{R}|} \quad (29)$$

où $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$ désigne le moment cinétique associé au mouvement relatif . Remarquons que l'Hamiltonien réduit dépend de la constante du mouvement \vec{c} .

Interprétation des termes de H_R :

- Si $|\vec{R} \times \vec{B}|$ est négligeable devant $|\vec{P}_G|$, c'est-à-dire si l'intensité du champ magnétique modifie peu le mouvement relatif (ce qui se produit soit pour des états peu excités, soit pour des champs peu intenses), \vec{c} est très peu différent de $\vec{\pi}_G$; $\frac{\vec{c}}{M}$ représente la vitesse de translation

de l'atome et le terme $\frac{\vec{c}^2}{2M}$ l'énergie cinétique associée. Le terme $\frac{-q}{M} (\vec{c} \times \vec{B}) \cdot \vec{R}$ couple le mouvement global avec le mouvement relatif. Il s'apparente formellement à une énergie potentielle électrique $-q \vec{F} \cdot \vec{R}$ où $\vec{F} = \frac{\vec{c}}{M} \times \vec{B}$; nous l'appellerons champ électrique motionnel. En effet, dans son référentiel propre qui se déplace à la vitesse $\frac{\vec{c}}{M}$, l'atome voit les champs croisés magnétique \vec{B} et électrique $\frac{\vec{c}}{M} \times \vec{B}$.

$$\text{Le terme } \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{q}{2} \left(\frac{m_2 - m_1}{m_1 m_2} \right) \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{q^2}{8\mu} (\vec{R} \times \vec{B})^2 - \frac{e^2}{|\vec{R}|}$$

représente l'Hamiltonien d'une particule de masse μ , de charge $+q$, placée dans un champ magnétique \vec{B} et soumise à une interaction coulombienne centrale, à ceci près que le terme paramagnétique est multiplié par un facteur $g = \frac{m_2 - m_1}{m_1 + m_2}$ (g représente le facteur gyromagnétique de la particule fictive). Cet effet est inférieur à 10^{-3} pour l'atome hydrogénéoïde.

- Si l'électron et le noyau sont faiblement couplés, ce qui est le cas lorsque l'on s'intéresse à l'ionisation de l'atome, l'interprétation des termes et, en particulier, de la constante \vec{c} est beaucoup moins évidente. Il semble plus légitime de revenir à l'Hamiltonien à deux particules, le terme coulombien étant considéré comme faible, $\langle \vec{R} \rangle$ étant une distance moyennée sur les mouvements quasi-indépendants des deux particules soumises au champ magnétique.

Conclusion : L'énergie du centre de masse et l'énergie de la particule réduite ne sont pas simultanément conservées ; un transfert de l'une à l'autre est possible.

L'étude de l'atome en champ magnétique est néanmoins réductible à celle d'une particule unique soumise à un champ coulombien radial et plongée dans des champs magnétique et électrique uniformes croisés.

Remarque : La réduction est possible de la même façon pour les atomes alcalins traités en remplaçant le potentiel coulombien $\frac{-e^2}{|\vec{R}|}$ par $V(R)$, potentiel à symétrie sphérique créé par le noyau et les électrons des couches complètes du cœur.

3. L'Hamiltonien réduit.

D'après le paragraphe précédent, cet Hamiltonien s'écrit :

$$H_{R,\vec{c}} = \frac{\vec{c}^2}{2M} - \frac{q}{M} (\vec{c} \times \vec{B}) \cdot \vec{R} + \frac{\vec{P}^2}{2\mu} - \frac{q}{2\mu} \times g \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{q^2}{8\mu} (\vec{R} \times \vec{B})^2 - \frac{e^2}{|\vec{R}|}$$

avec
$$g = \frac{m_2 - m_1}{m_1 + m_2} .$$

g peut être considéré comme le facteur gyromagnétique.

A - Le champ électrique motionnel.

Evaluons l'ordre de grandeur du champ électrique motionnel dans l'hypothèse où l'on peut assimiler $\frac{\vec{c}}{M}$ à la vitesse thermique de l'atome. Pour un atome de Lithium, à la température de 600°C, la vitesse thermique est de l'ordre de 1000 m/s et le champ électrique motionnel est alors de l'ordre de 40 V/cm pour $B = 4$ T .

Un champ d'une telle valeur entraîne des modifications de comportements expérimentaux [30-34] , surtout au voisinage de la limite d'ionisation où l'électron est peu lié [35-37] . C'est pourquoi il est utile, dans un premier temps, pour simplifier une étude déjà très complexe, de réduire fortement les effets de ce champ électrique motionnel. Ceci est possible expérimentalement en travaillant avec un jet atomique parallèle au champ magnétique.

Il sera possible dans un deuxième temps d'étudier spécifiquement cet effet en plaçant le jet perpendiculairement au champ magnétique.

L'exemple numérique est tiré de notre choix expérimental : un jet atomique de Lithium issu d'un four chauffé à 600°C. De nombreuses expériences ont été faites essentiellement en cellule à des températures moins élevées et pour des alcalins plus lourds [21, 24, 38-42] le champ électrique motionnel est alors plus faible.

Nous supposerons ce terme nul pour la suite de l'étude.

B - Symétries et constantes du mouvement.

Nous supprimons les termes $\frac{\vec{c}^2}{2M}$ et $\frac{-q}{M} (\vec{c} \times \vec{B}) \cdot \vec{R}$ qui sont des constantes additives à l'énergie associée au mouvement relatif et nous étudierons, dans la suite, l'Hamiltonien $H_R = H_{R, \vec{c}=\vec{0}}$, correspondant à $\vec{c}=\vec{0}$ ou M infiniment grand

$$H_R = \frac{\vec{P}^2}{2\mu} + g \left(\frac{-q}{2\mu} \vec{B} \cdot \vec{L} \right) + \frac{q^2}{8\mu} (\vec{R} \times \vec{B})^2 - \frac{e^2}{|\vec{R}|} .$$

Parmi les symétries existant en champ magnétique nul, il ne subsiste que :

- la symétrie cylindrique : L_z commute avec H_R et est donc une constante du mouvement ;
- la parité totale Π_t : le changement $\vec{R} \rightarrow -\vec{R}$ (inversion) laissant l'Hamiltonien invariant.

L'existence de la constante L_z permet de ramener l'équation de Schrödinger tridimensionnelle

$$H_R \varphi(\rho, z, \varphi) = E_R \varphi(\rho, z, \varphi)$$

à l'équation bidimensionnelle dans un sous-espace M fixé

$$H_D \Psi(\rho, z) = E_D \Psi(\rho, z) \quad (30)$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi(\rho, z, \varphi) = \frac{e^{+iM\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \Psi(\rho, z) \\ H_D = \frac{\vec{P}^2(\rho, z)}{2\mu} + \frac{M^2 \pi^2}{2\mu \rho^2} - \frac{e^2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + \frac{q^2 B^2}{8\mu} \rho^2 = H_R + \frac{q}{2\mu} \vec{B} \cdot \vec{L} \\ E_D = E_R + g M \pi \frac{qB}{2\mu} \\ \vec{P}^2(\rho, z) = -\frac{\pi^2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \pi^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{array} \right.$$

M étant un nombre quantique exact, nous nous placerons toujours dans un sous-espace de M donné et nous étudierons l'Hamiltonien H_D . Pour alléger les notations nous poserons $R=r$, $g=1$ et $m=\mu$, en sachant

que l'on pourra à tout moment faire intervenir les termes exacts dans les résultats.

H_D est insensible au changement de signe de M , les fonctions propres $\Psi(\rho, z)$ associées aux valeurs propres M et $-M$ seront les mêmes ainsi que la valeur propre E_D . Par contre l'énergie E_R diffère selon le signe de M , l'écart étant dû à la contribution du terme paramagnétique.

La transformation d'inversion $z \rightarrow -z$ laisse invariant l'Hamiltonien H . Π_z est donc une constante du mouvement qui est reliée à la parité totale

$$\text{par } \Pi_z = (-1)^M \Pi_t$$

L'équation de Schrödinger $H_D \Psi = E_D \Psi$ n'a pas encore trouvé de résolution exacte et ne se sépare dans aucun système de coordonnées spatiales. Nous allons l'écrire dans trois systèmes de coordonnées et en unités atomiques (l'unité d'énergie est alors le Hartree).

En coordonnées sphériques :

$$-\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \Psi(r, \theta)) - \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{M^2}{\sin^2 \theta} \right) \Psi(r, \theta) + \left(\frac{\gamma^2 r^2 \sin^2 \theta}{4} - \frac{2}{r} \right) \Psi(r, \theta) = 2E_D \Psi(r, \theta) . \quad (31)$$

En coordonnées paraboliques :

$$-\frac{4}{\xi + \eta} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} (\xi, \eta) \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} (\xi, \eta) \right) \right] + \left(\frac{M^2}{\xi \eta} - \frac{4}{\xi + \eta} + \frac{\gamma^2}{4} \xi \eta \right) \Psi(\xi, \eta) = 2E_D \Psi(\xi, \eta) . \quad (32)$$

En coordonnées cylindriques :

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} (\rho, z) \right) - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} (\rho, z) + \left(\frac{M^2}{\rho^2} - \frac{2}{\rho^2 + z^2} - \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 \right) \Psi(\rho, z) = 2E_D \Psi(\rho, z) . \quad (33)$$

Dans les systèmes sphérique et parabolique, l'Hamiltonien d'un système

hydrogénoïde isolé se sépare ; ces coordonnées seront donc adaptées au cas des champs magnétiques faibles. Le système cylindrique sépare l'Hamiltonien de Landau H_L (§.I.B.) , il sera adapté au cas de champs magnétiques très intenses.

C - Règles de sélection pour les probabilités de transition
dipolaire électrique à un photon.

La mise en évidence expérimentale des états de l'atome en champ magnétique peut être réalisée en excitant optiquement l'atome à un photon à partir de son état fondamental ou à plusieurs photons en passant par des niveaux relais.

Les forces d'oscillateur des transitions dipolaires électriques à un photon sont proportionnelles au carré de l'élément de matrice réduit de l'opérateur dipolaire électrique calculé entre la fonction d'onde de l'état initial et la fonction d'onde de l'état final [4]

$$\langle \Psi_i || q \vec{R} || \Psi_f \rangle .$$

On peut tirer un certain nombre de règles de sélection en utilisant les propriétés de symétries de l'opérateur $\vec{d} = q \cdot \vec{R}$ et les propriétés de symétrie exactes de l'Hamiltonien de l'atome d'Hydrogène soumis à un champ magnétique.

L'opérateur \vec{R} étant impair dans une transformation d'inversion, les nombres quantiques Π_{t_i} et Π_{t_f} des états initial et final doivent vérifier

$$\Pi_{t_i} \times \Pi_{t_f} = -1 .$$

La polarisation du champ électromagnétique excitateur et l'existence du nombre quantique M entraînent des règles de sélection pour les nombres quantiques M et Π_z (réflexion par rapport au plan $z=0$) .

$$\left\{ \begin{array}{lll} \text{Polarisation } \sigma^+ & & \Delta M = +1 \quad \Pi_{z_i} \times \Pi_{z_f} = +1 \\ \text{Polarisation } \Pi & \Delta M = M_f - M_i & \Delta M = 0 \quad \Pi_{z_i} \times \Pi_{z_f} = -1 \\ \text{Polarisation } \sigma^- & & \Delta M = -1 \quad \Pi_{z_i} \times \Pi_{z_f} = +1 \end{array} \right.$$

Ce sont les seules règles de sélection exactes que l'on puisse obtenir puisque les fonctions d'onde ne possèdent que la symétrie de parité et la symétrie cylindrique autour de l'axe Oz. Nous trouverons cependant d'autres règles approchées dans les domaines particuliers que nous étudierons.

D - Effets relativistes.

Jusqu'à maintenant toutes nos approches étaient non relativistes et on peut se demander quelles modifications entraîneraient les effets relativistes et, en particulier, l'existence du spin de l'électron et du noyau.

Ces effets sont de deux sortes :

- les effets dus au couplage entre les spins et le champ magnétique ;
- ceux existant en champ nul : structure fine (couplage spin orbite), structure hyperfine (couplage entre le moment magnétique -ou quadrupolaire- et les moments cinétiques de spin et d'orbite de l'électron).

Le couplage des spins de l'électron et du noyau avec le champ magnétique \vec{B} se traduit par le terme H_1 :

$$H_1 = -q B \hbar \left(\frac{g_1 S_{1z}}{2m_1} - \frac{g_2 S_{2z}}{2m_2} \right) ,$$

g_i est le facteur gyromagnétique de la particule i ;

les indices 1 et 2 se rapportent respectivement à l'électron et au noyau ;

H_1 commute avec l'hamiltonien total non relativiste que nous avons utilisé jusqu'à maintenant. Dans ce cas S_{1z} et S_{2z} sont des constantes du mouvement. La fonction d'onde ne diffère que par la multiplication par une fonction d'onde de spin. Lorsqu'on ne considère que le

spin de l'électron, l'énergie est modifiée par l'addition d'un terme paramagnétique de spin qui dédouble chaque niveau.

Quant aux termes relativistes existant en champ magnétique nul, ils sont en général très faibles pour les niveaux excités de l'atome qui constituent plus particulièrement l'objet de notre étude. Donnons par exemple un ordre de grandeur du terme spin orbite dont la partie angulaire est donnée par $\vec{L} \cdot \vec{S}$. Il est de l'ordre de $0,34 \text{ cm}^{-1}$ pour l'écart $2P_{1/2} - 2P_{3/2}$ de l'hydrogène et variant en n^{-3} , il est de l'ordre de $8 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ pour l'écart $15P_{1/2} - 15P_{3/2}$.

Ainsi, pour les niveaux profonds, il faut tenir compte de ces effets, mais, pour les états excités, l'utilisation de l'Hamiltonien non relativiste est justifiée. On peut éventuellement ajouter le terme paramagnétique de spin qui, dans un sous-espace M_S fixé, pour \vec{B} suffisamment intense (zone Paschen-Bach où \vec{S} et \vec{L} sont découplés [22]), introduit une même constante additive à l'énergie de tous les niveaux.

E - Conclusion.

Arrivés à ce point, nous ne pouvons poursuivre plus avant une étude exacte de l'atome d'hydrogène en champ magnétique. Nous devons choisir des méthodes approchées et pour cela restreindre et définir le domaine d'étude dans lequel nos investigations seront valides.

Dans certains objets astrophysiques il existe des champs magnétiques très intenses ; ainsi cette intensité atteint des valeurs de 10^2 à 10^5 T dans les naines blanches et de 10^6 à 10^9 T dans les étoiles à neutrons. De plus, en physique des solides, l'exciton -c'est-à-dire l'ensemble formé par un trou et un électron liés- est équivalent à un système hydrogénoïde possédant une masse réduite beaucoup plus faible que celle de l'électron. La constante diélectrique du milieu est très supérieure à l'unité ce qui diminue l'intensité de la force coulombienne. Par conséquent l'exciton, qui possède une énergie de liaison beaucoup plus

faible que l'Hydrogène, est particulièrement sensible aux effets du champ magnétique. Suivant le milieu considéré le champ critique B_c^{excit} , caractéristique de l'exciton (cf. §.I.3.), peut être inférieur à 1 Tesla [22]. C'est pourquoi de nombreux théoriciens se sont intéressés à l'étude du niveau fondamental et des niveaux profonds de l'atome d'Hydrogène soumis à des champs superintenses dans le but d'accéder à des grandeurs mesurables : niveaux, énergies, potentiel d'ionisation, probabilités de transition, sections efficaces de photo-ionisation ou de recombinaison. Les méthodes théoriques utilisées sont très variées ; en général l'Hamiltonien d'ordre zéro est l'Hamiltonien de Landau H_L (§.II.1.B.α., Eq. ()) décrivant le mouvement suivant les variables ρ et φ . Les fonctions d'onde d'ordre zéro $\Phi_{n_\rho M}^{\text{Lan}}(\rho) \frac{e^{iM\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$ sont connues sous forme analytique [43]. Les solutions générales de l'Hamiltonien H_R (§.II.3.B., Eq. (29)) sont cherchées, dans le sous-espace M fixé, sous la forme

$$\varphi(\rho, z, \varphi) = \sum_{n_\rho \geq 0} \Phi_{n_\rho M}^{\text{Lan}}(\rho) \times g_{n_\rho}(z) \frac{e^{iM\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad . \quad (34)$$

Les fonctions $g_{n_\rho}(z)$ sont les solutions d'un système d'équations différentielles couplées où apparaissent le potentiel effectif diagonal $V_{n_\rho, n_\rho}(z)$ et les potentiels de couplage $V_{n_\rho, n'_\rho}(z)$ [44]

$$V_{n_\rho, n'_\rho}(z) = -e^2 \int_0^\infty \rho \, d\rho \, \Phi_{n_\rho, M}^{\text{Lan}}(\rho) \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} \Phi_{n'_\rho, M}^{\text{Lan}}(\rho) \quad (35)$$

$$V_{n_\rho, n_\rho}(z) \rightarrow -\frac{1}{|z|} \quad \text{si} \quad |z| \rightarrow \infty \quad .$$

Pour résoudre ce système on peut utiliser une méthode itérative dérivée de la Méthode de Hartree-Fock [45, 46] ; cette méthode est également applicable à l'étude des systèmes à plusieurs électrons [47, 48]. D'autres auteurs, après avoir choisi une base pour décrire les fonctions $g_{n_\rho}(z)$ (par exemple des gaussiennes de position et largeur différentes), résolvent ce système par diagonalisation [44, 49-51]. On peut également utiliser des méthodes type matrice de réaction [52, 53], ou bien celles utilisant le formalisme des coordonnées complexes effectuant

la transformation $\rho \rightarrow \rho e^{i\alpha}$ [54], ce qui fait apparaître des valeurs propres complexes (position et largeur). Les trois dernières méthodes citées ci-dessus [49 - 54] permettent non seulement d'étudier les états liés du système, mais aussi les états autoionisés d'énergie supérieure à l'énergie du premier niveau de Landau.

En champ magnétique superintense, les niveaux du spectre se regroupent en multiplets correspondant aux différents niveaux de Landau d'écart $\hbar\omega_c$. La sous-structure d'un multiplet (n_{p_0}, M fixés) peut être étudiée dans l'approximation adiabatique, les oscillations de l'électron dans la direction Oz ayant une fréquence beaucoup plus faible que la fréquence cyclotron $2\pi\omega_c$. Dans cette hypothèse, le développement apparaissant dans l'équation précédente (35) ne comporte que le seul terme n_{p_0} . La méthode variationnelle peut alors être utilisée avec profit pour déterminer la fonction radiale $g_{n_{p_0}}(z)$ [22, 55].

On peut montrer [44] que les spectres obtenus se décomposent en deux séries correspondant aux fonctions paires et impaires et qu'ils sont dans ce cas quasi hydrogénéoïdes, et l'énergie s'écrit en unités atomiques :

$$E = \gamma \left(n_{p_0} + \frac{|M| + M + 1}{2} \right) + E_1$$

pour $E_1 < 0$, $E_1 = \frac{-1}{2(n_z + \delta)^2}$, n_z nombre quantique longitudinal ;

pour $E_1 > 0$, un continuum ;

δ dépendant de la parité de l'état, est positif, car, à courte distance, le potentiel est moins attractif que $-\frac{1}{|z|}$.

Nous ne développerons pas plus avant ce point ; nous retiendrons simplement que le spectre prend l'allure du spectre d'états de Landau dans lequel, pour chaque état, n_{p_0}, M, Π_z apparaît un spectre quasi-hydrogénéoïde.

Expérimentalement, des comportements de ce type ont été observés dans des cristaux en Physique du Solide [96]. En Physique Atomique, les premières observations ont été faites sur le Césium [97] où l'on peut mettre en évidence une période de $1,1\pi\omega_c$ dans le signal de photo-ionisation à 100 cm^{-1} au-dessus de la limite d'ionisation en champ nul. Cette période est très proche de la période caractéristique des niveaux de Landau et l'approximation adiabatique semble justifiée.

Depuis l'étude par Garton et Tomkins [21] du spectre d'absorption du Barium en présence d'un champ magnétique, de nombreuses équipes se sont intéressées à l'étude des niveaux très excités de l'atome en présence d'un champ magnétique d'intensité accessible en laboratoire (0 - 6 T). Nous allons rappeler ces résultats théoriques dans le paragraphe suivant.

III - Les états très excités des atomes en présence d'un champ magnétique intense.

Nous avons vu lors d'une description classique simplifiée (Deuxième Chapitre, I.3.) l'existence de trois domaines caractérisés par la valeur du terme γn^3 ($\gamma = B/B_c$ avec $B_c = 2,35 \cdot 10^5\text{ T}$) reliant l'intensité relative des forces magnétique et coulombienne.

$$\gamma n^3 \ll 1 \quad \text{Force magnétique} \ll \text{Force coulombienne},$$

$$\gamma n^3 \sim 1 \quad \text{Force coulombienne de même ordre que la force magnétique},$$

$$\gamma n^3 \gg 1 \quad \text{Force coulombienne} \ll \text{Force magnétique}.$$

Dans le traitement quantique, grâce à la symétrie cylindrique, le terme paramagnétique n'apporte qu'un déplacement global des énergies des niveaux d'un sous-espace M fixé. Le terme diamagnétique fait apparaître trois zones analogues à celles décrites ci-dessus, mais situées dans le diagramme (E, B) (énergie du système, intensité du champ magnétique).

- La zone "diamagnétique" où le terme diamagnétique est une perturbation par rapport à l'hamiltonien en champ nul H_0 ;
- Une zone intermédiaire voisine de la limite d'ionisation en champ nul que nous appellerons zone de quasi Landau où le terme diamagnétique et le terme coulombien sont du même ordre de grandeur ;
- Une zone de champ fort, où le terme coulombien est une perturbation par rapport au terme diamagnétique (Niveaux de Landau).

1. Zone diamagnétique.

Nous voulons traiter le terme diamagnétique en perturbation, levant ainsi la dégénérescence pour l'atome isolé des niveaux de Rydberg de même nombre quantique principal. Pour qu'une théorie perturbative au premier ordre soit valable, il faut que l'intensité de la perturbation soit faible devant l'écart entre deux niveaux non perturbés.

Dans ce paragraphe 1 nous utiliserons systématiquement les unités atomiques.

Le terme diamagnétique s'écrit :

$$h_D = \frac{\gamma^2}{8} \rho^2 = \frac{\gamma^2}{8} r^2 \sin^2 \theta \quad .$$

Pour un niveau n le rayon de la trajectoire classique croît comme n^2 [4]. L'écart entre deux niveaux non perturbés consécutifs est $\frac{1}{n^3}$. Il en résulte qu'une théorie perturbative au premier ordre dans l'espace n fixé n'est valable que si

$$\frac{\gamma^2}{8} n^4 \ll \frac{1}{n^3} \quad \Rightarrow \quad \gamma n^{7/2} \ll 1 \quad . \quad (36)$$

Cette condition est plus restrictive que $\gamma n^3 \ll 1$. Pour les états vérifiant $\gamma n^3 \ll 1$, mais pour lesquels la condition $\gamma n^{7/2} \ll 1$ n'est pas réalisée, on doit considérer le couplage par le terme diamagnétique entre des niveaux de multiplicité différente (n différent).

A - Etude de l'effet diamagnétique à l'intérieur d'un multiplet
n fixé.

Dans cette hypothèse, h_D couple les états de même n , mais de l différents.

α - Hydrogène.

Le niveau n est dégénéré n^2 fois, mais M est un bon nombre quantique et l'on peut diagonaliser la matrice d'interaction magnétique à l'intérieur d'un espace à n et M donnés. Nous devons donc calculer les éléments de matrice (écrits en coordonnées sphériques)

$$\langle n, l, M | h_D | n, l', M \rangle = \frac{Y^2}{8} \langle n, l, M | r^2 \sin^2 \theta | n, l', M \rangle .$$

Ces éléments de matrices ne dépendent que de $|M|$.

La partie radiale vaut $\langle n, l | r^2 | n, l' \rangle$ et peut être calculée analytiquement à partir des expressions des fonctions radiales hydrogénoïdes. La partie angulaire vaut $\langle l, M | \sin^2 \theta | l', M \rangle$ avec

$$\cos \theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{l=1, M=0} .$$

Ces éléments de matrice sont donc calculables grâce aux relations de compositions des harmoniques sphériques Y_{lM} [2].

On obtient finalement [22] :

$$\begin{aligned} \langle n, l, M | r^2 \sin^2 \theta | n, l, M \rangle &= n^2 [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] \frac{l^2 + l - 1 + M^2}{(2l-1)(2l+3)} \\ \langle n, l, M | r^2 \sin^2 \theta | n, l+2, M \rangle &= -\frac{5}{2} n^2 [n^2 - (l+2)^2]^{\frac{1}{2}} [n^2 - (l+1)^2]^{\frac{1}{2}} \\ &\quad \times \left\{ \frac{[(l+1)^2 - M^2][(l+2)^2 - M^2]}{(2l+1)(2l+3)^2(2l+5)} \right\}^{1/2} . \end{aligned} \quad (37)$$

Les autres éléments sont nuls ; en effet h_D étant la combinaison d'un tenseur de rang 2 et d'un tenseur de rang 0, l'élément de matrice est non nul si $l' = l, l \pm 2$. On peut donc diagonaliser séparément les

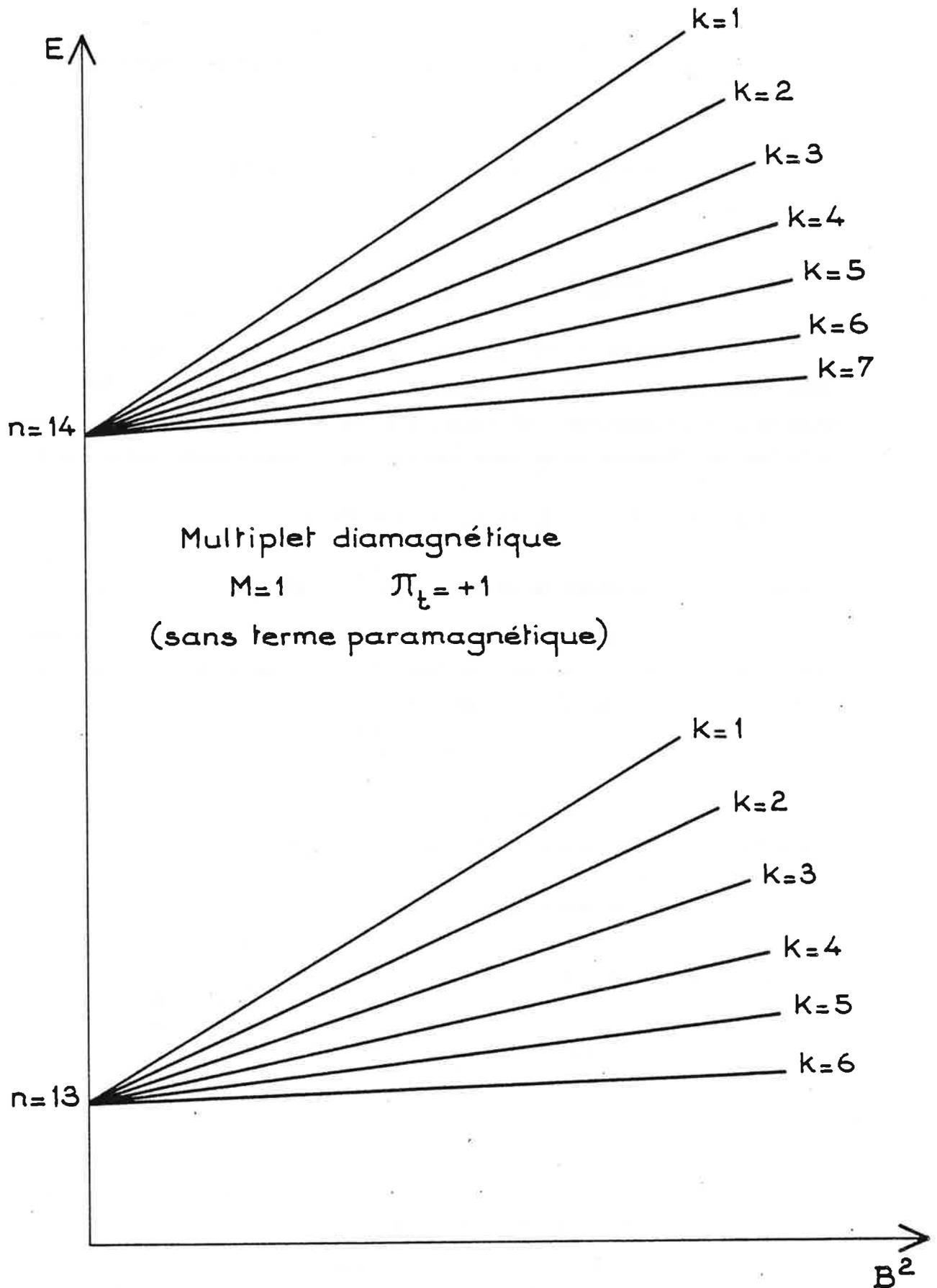


Figure II.2 : Multiplets diamagnétiques $M=1$, $\Pi_t = +1$, $n=13$ et $n=14$.
 Numérotation K par ordre d'énergie décroissante.

états de l pairs et de l impairs, ce qui n'est qu'une manifestation de la conservation de la parité totale Π_t .

La dimension des matrices à diagonaliser est déterminée par le nombre de valeurs de l possibles, ayant la même parité, avec de plus la condition $|M| \leq l \leq n-1$.

Les éléments de matrice de l'interaction diamagnétique h_D sont proportionnels à γ^2 , donc à B^2 . Il sera donc très pratique de représenter graphiquement l'évolution des énergies des niveaux (valeurs propres de l'Hamiltonien H_D) en fonction de l'intensité du champ dans le diagramme (E, B^2) (voir Figure II.2). Les états propres obtenus sont des combinaisons linéaires des états $|n, l, M\rangle$, et sont donc aussi vecteurs propres de l'Hamiltonien sans champ magnétique. On les note $|n, K, \Pi_t, M\rangle$, K numérotant les états par valeurs d'énergie décroissantes, c'est-à-dire par valeurs de $\langle \rho^2 \rangle$ décroissantes. Dans un espace de n , M et Π_t donnés, le spectre d'énergie de l'Hamiltonien diamagnétique H_D est donc

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{2n^2} + \frac{1}{8} \gamma^2 \langle n, K, \Pi, M | \rho^2 | n, K, \Pi, M \rangle \\ &= -\frac{1}{2n^2} + \frac{1}{8} \gamma^2 \langle \rho^2 \rangle_K \end{aligned} \quad (38)$$

La valeur moyenne de ρ^2 sur l'état $|n, K, \Pi, M\rangle$ (*) étant indépendante de B , l'énergie du niveau K en fonction de B^2 est représentée par une droite de pente $\frac{1}{8Bc^2} \langle \rho^2 \rangle_K$ et le spectre a l'allure générale d'un ensemble de multiplets issus chacun de l'état n en champ magnétique nul (voir Figure II.2).

* Quand nous écrivons Π et M sans préciser davantage, Π est équivalent à Π_t , valeur propre dans la transformation d'inversion et est relié à Π_z , valeur propre dans la transformation de réflexion par rapport au plan $z=0$ par $\Pi_z = (-1)^M \Pi_t$.

La décomposition des vecteurs propres $|n, K, \Pi, M\rangle$ sur les vecteurs $|n, \ell, M\rangle$ s'écrit :

$$|n, K, \Pi, M\rangle = \sum_{\substack{\ell \text{ pair} \\ \text{ou } \ell \text{ impair}}} a_{\ell, K}^{M, n} |n, \ell, M\rangle \quad (39)$$

et il n'existe pas de dépendance simple des coefficients $a_{\ell, K}^{M, n}$ entre eux.

La base $|n, K, \Pi, M\rangle$ est de plus la seule qui respecte les symétries en champ magnétique faible ; malheureusement ces fonctions de base ne peuvent être définies que de façon numérique .

Insistons bien sur le fait que M et Π sont des nombres quantiques exacts, que n n'est qu'un nombre quantique approché, caractéristique des états en champ nul et que K est une numérotation. K a tout de même un sens physique puisque les fonctions d'onde de K faibles ($K = 1$ ou 2) sont celles qui correspondent à la plus grande extension de ρ , et aussi à une plus forte localisation dans le plan $z=0$ si leurs coefficients $a_{\ell, K}^{M, n}$ sur la composante de plus faible ℓ sont les plus importants [7].

Expérimentalement (nous reviendrons sur ce point), l'intensité des raies des multiplets dépend des forces d'oscillateurs des transitions permises, c'est-à-dire des carrés des éléments de matrice :

$$|\langle \Psi_i | \vec{E} \cdot \vec{R} | n, \Pi, M, K \rangle|^2 \quad (40)$$

* Notons qu'au lieu d'utiliser les coordonnées sphériques, il est possible de construire, à partir de combinaisons linéaires, des états propres de l'Hydrogène en coordonnées paraboliques $|n, n_1, n_2, M\rangle$ des états de parité totale Π_t déterminée [56]. On peut également construire des nouvelles bases dans lesquelles la matrice de l'opérateur diamagnétique H_D est presque diagonale [57, 58]. La recherche de telles bases sous une forme analytique permet de mettre en évidence des symétries approchées dans le problème de l'atome d'Hydrogène soumis à un champ magnétique.

où \vec{E} est le champ électromagnétique de la lumière excitatrice, et Ψ_i la fonction d'onde d'un niveau profond, considéré ici comme faiblement perturbé par le champ magnétique.

Compte tenu des règles de sélection sur l'opérateur dipolaire électrique (§.II.3.C.) l'intensité des signaux observés dépend donc de manière évidente des coefficients $a_{\ell,K}^{M,n}$ et pourra être très différente selon le mode d'excitation choisi, par exemple selon la polarisation de la lumière π , σ^+ ou σ^- qui conduit à des transitions de $\Delta M = 0, +1$ ou -1 , ou selon qu'on excite le niveau fondamental de l'atome avec un ou plusieurs photons.

β - Les atomes alcalins.

Pour les atomes alcalins, le potentiel central n'est plus coulombien et la dégénérescence en ℓ des niveaux sans champ magnétique est levée. Le potentiel de cœur $V_{\text{cœur}}(r)$ est encore à symétrie sphérique et seules les fonctions d'onde radiales sont différentes. Les énergies des niveaux non hydrogénoïdes sont données par :

$$E = - \frac{1}{2(n - \delta_{n,\ell})^2} = - \frac{1}{2(n^*)^2} \quad \text{avec } n^* = n - \delta_{n,\ell} \\ \text{et } \delta_{n,\ell} \text{ défaut quantique.}$$

$\delta_{n\ell}$ dépend très peu de n mais fortement de ℓ .

C'est une fonction décroissante de ℓ , car l'électron a une probabilité de présence de plus en plus faible dans le cœur à mesure que ℓ augmente.

Donnons quelques valeurs numériques [59]

	$\delta_{\ell=0}$	$\delta_{\ell=1}$	$\delta_{\ell=2}$	$\delta_{\ell=3}$
Li	0,399(6)	0,053(9)	0,002	
Na	1,3470(14)	0,8541(13)	0,0144(4)	
Rb	3,135(1)	2,651(8)	1,342(3)	
Cs	4,057(2)	3,578(17)	2,471(5)	0,033(1)

A champ nul, les niveaux de même n et de ℓ différents sont donc

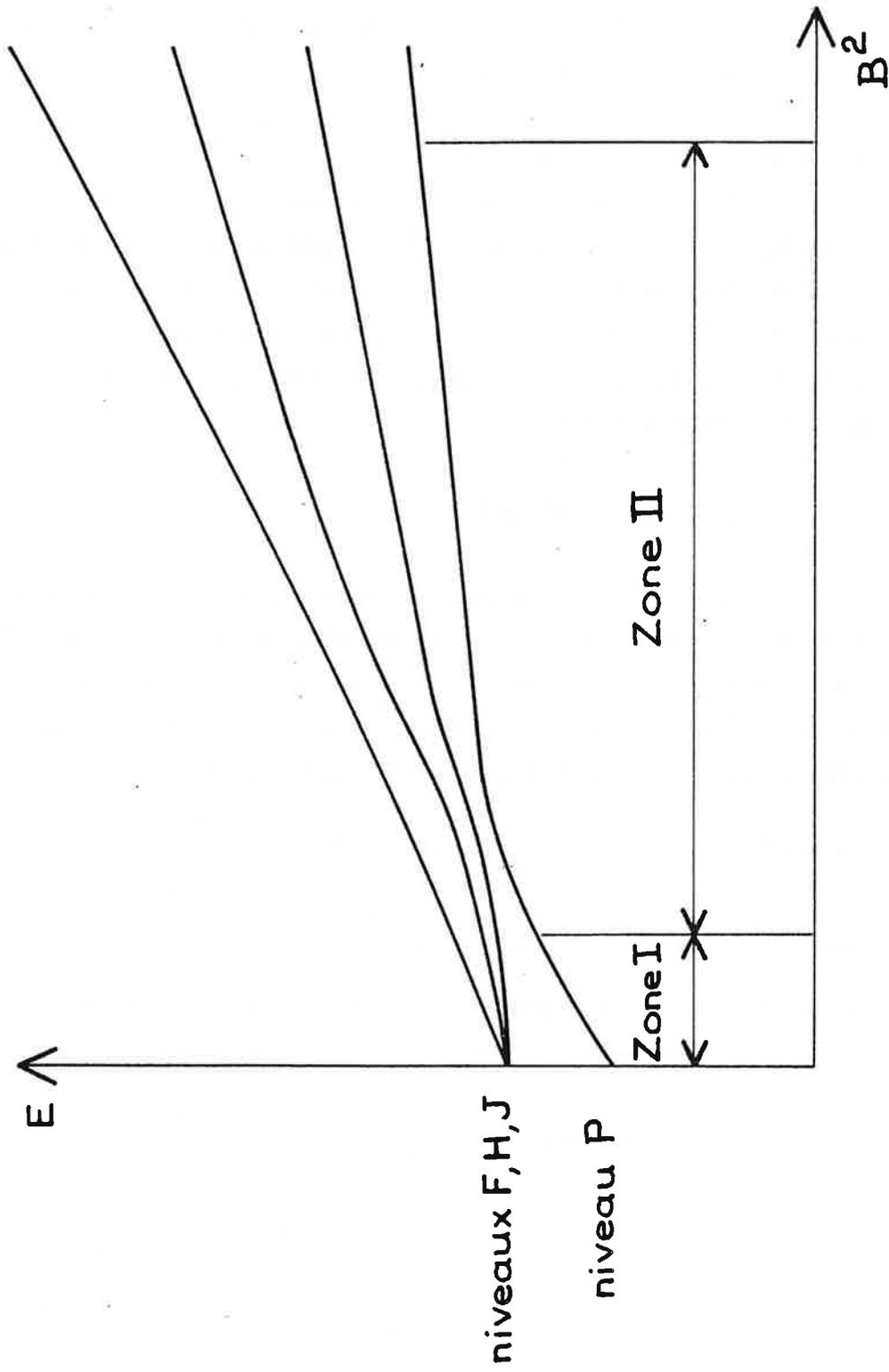


Figure II.3 : Influence du défaut quantique sur un multiplet diamagnétique en champ faible.

non dégénérés, en particulier pour les niveaux de l petit. A champ magnétique très faible, on peut utiliser la méthode de perturbation d'états non dégénérés, valable si la perturbation est plus faible que l'écart entre deux niveaux de l différents

$$\frac{\gamma^2 n^4}{8} \ll \frac{|\delta_{nl} - \delta_{nl'}|}{n^3} \quad (l, l' \text{ de même parité})$$

(zone I de la figure) .

On a alors (en ne tenant pas compte du terme paramagnétique)

$$E = -\frac{1}{2n^{*2}} + \frac{\gamma^2}{8} \langle n^*, l, m | \rho^2 | n^*, l, m \rangle .$$

L'élément de matrice angulaire a déjà été calculé ; l'intégrale radiale est obtenue par la méthode du défaut quantique [60]

$$E = -\frac{1}{2n^{*2}} + \frac{\gamma^2}{8} n^{*2} [5n^{*2} + 1 - 3l(l+1)] \frac{(l^2 + l - 1 + M^2)}{(2l-1)(2l+3)} . \quad (41)$$

Cet effet permet d'interpréter les premiers résultats obtenus sur le diamagnétisme [21, 61-64] et de retrouver les déplacements observés sur les niveaux profonds.

Si $\delta_{n,l} \ll 1$, on peut considérer que les états $|n, l\rangle$ sont dégénérés en l'absence de champ magnétique. Quand le déplacement des niveaux dû à l'effet diamagnétique devient comparable à la distance entre niveaux $|n, l\rangle$ et $|n, l'\rangle$ pour lesquels l et l' ont même parité, on doit diagonaliser la matrice d'interaction sur l'ensemble du sous-espace n fixé (zone II de la figure) [7, 34, 65]. Dans le cas du Lithium, pour les états de l impairs, les effets du défaut quantique sont très faibles puisque le premier état considéré P a lui-même un défaut quantique de 0,05. Le spectre est alors très analogue à celui de l'Hydrogène (Voir Figure II.3)

$$E = -\frac{1}{2n^{*2}} + \frac{1}{8} \left(\frac{B}{B_c}\right)^2 \langle \rho^2 \rangle_{K,B} .$$

Pour les états de défauts quantiques plus élevés ($\delta > 0,3$), notre approche permet de calculer ce qui se passe dans la zone I. La zone II nécessite de prendre en compte les états de ℓ et de n voisins : par exemple, le niveau nS du Lithium de défaut quantique 0,39 est situé entre des niveaux nD et $(n-1)D$.

Expérimentalement, l'intensité des raies des multiplets pour les atomes alcalins dépend des forces d'oscillateurs

$$|\langle \Psi_i | \vec{E} \cdot \vec{R} | n, \Pi, M, K \rangle|^2$$

comme nous l'avons décrit dans le cas de l'atome d'Hydrogène. Si les parties angulaires des fonctions d'onde sont les mêmes, les parties radiales sont maintenant différentes et modifient donc la fonction d'onde Ψ_i de l'état initial et les coefficients $a_{\ell, K}^{M, n}$ intervenant dans la diagonalisation (Eq. (39)). A priori, on peut penser que les spectres hydrogénoïdes et des alcalins auront des allures différentes.

Nous allons maintenant nous placer dans le cas où le champ magnétique est plus important et où le terme diamagnétique mélange des états de n différents. La diagonalisation de la matrice d'interaction diamagnétique H_D ne peut plus alors être réalisée dans un espace de n donné.

B - Etude de l'effet diamagnétique lorsque H_D couple les états de n différents.

α - Atome d'Hydrogène.

Lorsque le champ magnétique est tel que la condition $\gamma n^{7/2} \ll 1$ (§.III.1. - Eq. (36)) cesse d'être vérifiée, mais que $\gamma n^3 \ll 1$, tous les niveaux de n et de l différents interagissent à condition d'être associés aux mêmes nombres quantiques exacts Π_t et M . Les multiplets mis en évidence précédemment s'interpénètrent. La seule méthode pour accéder aux paramètres caractéristiques de l'interaction est la diagonalisation de la matrice d'interaction diamagnétique H_D dans une base d'états aussi grande que possible. Pour des raisons de symétrie, on peut choisir les bases sphériques $|n, l, M\rangle$ ou paraboliques $|n, n_1, n_2\rangle$ qui diagonalisent l'Hamiltonien en champ nul.

En effet, en coordonnées sphériques, les fonctions radiales hydrogénéoïdes ne forment un ensemble complet qu'à condition de tenir compte simultanément des fonctions du spectre discret $R_{n\ell}(r)$ et de celles du spectre continu $R_{E\ell}(r)$ ($E > 0$). Cependant il existe un ensemble complet de fonctions discrètes permettant de décrire les fonctions radiales : il s'agit des fonctions "Sturmiennes", fonctions non orthogonales mais permettant de prendre en compte les effets du continuum en utilisant une infinité dénombrable de fonctions d'onde. Ceci permet d'étudier par des méthodes de diagonalisation des états très excités d'énergie voisine de la limite d'ionisation en champ nul ($E \sim -5 \text{ cm}^{-1}$ pour $B \sim 5 \text{ T}$) et de déterminer non seulement la position des niveaux mais aussi l'intensité des raies observées [66 - 68].

Les spectres obtenus par ces différentes méthodes de diagonalisation font apparaître un grand nombre de niveaux issus des multiplets déjà décrits. Les Figures qui apparaissent dans les références [19, 65, 69] montrent que les multiplets interagissent très peu et s'interpénètrent sans se déformer, ce qui laisse supposer l'existence d'une symétrie

supplémentaire analogue à celle qui apparaît dans le cas de l'atome d'Hydrogène en présence d'un champ électrique et où les multiplets Stark se croisent.

En fait des calculs plus précis montrent que deux composantes K de deux multiplets de n différents ne se croisent pas mais forment un anticroisement de largeur faible. La largeur de ces anticroisements a été étudiée théoriquement [19, 69] dans l'Hydrogène pour des valeurs de n petites ($3 < n < 18$ et pour $n \sim 14$, $B < 50$ T) et des couples de niveaux du type ($|n, K=1\rangle$, $|n+1, K_{MAX}\rangle$) ou ($|n, K=1\rangle$, $|n+1, K_{Moyen}\rangle$) (K_{moyen} représentant le niveau K central du multiplet $n+1$). Les calculs montrent alors une dépendance exponentielle en $e^{-\alpha n}$ de cette largeur, α étant plus important pour le couple ($|n, K=1\rangle$, $|n+1, K_{MAX}\rangle$) que pour le couple ($|n, K=1\rangle$, $|n+1, K_{Moyen}\rangle$). Une extrapolation de la fonction $e^{-\alpha n}$ pour des valeurs plus élevées de n ($\sim 30-40$) donnent des largeurs d'anticroisement rapidement très petites (inférieures à 10^{-6} cm^{-1}) comparées à la largeur naturelle des niveaux.

Devant de tels comportements, certains auteurs [19, 69] ont proposé une décomposition de l'Hamiltonien diamagnétique

$$H_D = H_S + H_{nS}$$

où H_S est séparable et rend compte, comme pour l'atome H en présence de champ électrique, du croisement des multiplets et donc d'une constante du mouvement supplémentaire analogue au vecteur de Runge Lenz généralisé.

H_{nS} est un Hamiltonien non séparable traité perturbativement par rapport à H_S et qui permet d'expliquer la faible répulsion des niveaux. Une identification de cette symétrie en champ magnétique faible a été réalisée très récemment par plusieurs groupes. Nous allons en rappeler les résultats dans le paragraphe III.1.C..

β - Atomes alcalins.

On tient compte dans ce cas, dans la diagonalisation, de la perturbation due au défaut quantique des niveaux concernés. Dans la décomposition écrite ci-dessus (Eq. (30)), le caractère non coulombien du potentiel central introduit dans H_D le terme supplémentaire $V_{\text{cœur}}$. Lorsque le défaut quantique d'un niveau est de l'ordre de l'unité, le diagramme (E, B^2) présente des anticroisements de largeur importante due au fort caractère non hydrogénoïde du niveau. Lorsque les défauts quantiques des niveaux sont petits ($< 0,1$) le spectre d'énergie est quasi hydrogénoïde.

La largeur des anticroisements est modifiée d'une manière analogue à ce qui se passe dans le cas de l'interaction Stark. En effet, si un atome alcalin est soumis à un champ électrique uniforme, le potentiel $V_{\text{cœur}}$ à courte portée dû aux électrons du cœur, couple les états Stark calculés dans l'approximation hydrogénoïde et, au lieu de se croiser, les niveaux présentent alors des anticroisements [70, 71]. La loi de variation n'est donc plus en $e^{-\alpha n}$, mais devient une loi en n^{-4} [69]. Pour des n assez élevés, la taille des anticroisements est encore suffisamment importante et devrait pouvoir être mise en évidence expérimentalement.

C - Une symétrie dynamique approchée en champ faible.

Dans les résultats obtenus par diagonalisation dans la zone diamagnétique, l'observation d'anticroisements très étroits semblait révéler l'existence d'une constante du mouvement approchée. Récemment Solov'ev a montré, dans une étude classique, qu'il existait une intégrale du mouvement approchée, valable pour des états très excités de l'Hydrogène en présence d'un champ magnétique faible. Cette intégrale est constante à un terme en B^4 près et a pour expression [72] ;

$$\Lambda = 4 \vec{a}^2 - 5 a_z^2 \quad (42)$$

(\vec{a} est le vecteur de Runge Lenz réduit en énergie (§. II.1.A.γ., Eq. (21) et a_z sa projection suivant la direction du champ magnétique.

α - Approche classique.

En champ magnétique nul les trajectoires classiques de l'électron lié d'énergie $E_0 < 0$ sont les ellipses de Képler dont les paramètres sont liés aux constantes du mouvement (énergie E_0 ; moment cinétique $\vec{\ell}$ et vecteur de Runge-Lenz \vec{A}) (cf. Chapitre I, §.I.1.). Le plan de l'orbite est perpendiculaire à $\vec{\ell}$. La direction de \vec{a} représente celle du grand axe de l'ellipse de longueur b . Le module de \vec{A} est lié à ϵ , l'excentricité de l'ellipse, par la relation $\epsilon = \frac{|\vec{A}|}{e^2}$. L'énergie totale E_0 est égale à :

$$E_0 = - \frac{m e^4}{2|\vec{\ell}|^2} \left[1 - \frac{|\vec{a}|^2}{e^4} \right] = - \frac{e^2}{2b} \quad . \quad (43)$$

A une énergie E_0 donnée correspondent plusieurs trajectoires elliptiques de même grand axe $2b$, mais d'excentricité ϵ et de moment angulaire $\vec{\ell}$ différents.

En présence de champ magnétique, on tient compte facilement du terme paramagnétique en se plaçant dans le référentiel de Larmor (§.I.1.A.), l'énergie est alors modifiée mais la trajectoire reste une ellipse d'orientation fixée dans ce nouveau référentiel [16]. Dans ce référentiel apparaît, de plus, une force diamagnétique qui s'écrit dans le système SI $\vec{F}_D = \frac{-q^2}{4m} B^2 \vec{\rho}$ quadratique en B et qui, nous l'avons vu, rompt la supersymétrie de l'interaction coulombienne même à champ très faible. La trajectoire n'est plus rigoureusement une ellipse ; cependant lorsque cette force est faible devant la force coulombienne, on peut supposer que la trajectoire reste une ellipse dont les paramètres (excentricité, direction du grand axe, plan de l'ellipse...) évoluent lentement dans le temps, c'est-à-dire pendant des intervalles de temps correspondant à plusieurs révolutions de l'électron sur son orbite [73,74]. Les équations d'évolution s'écrivent en appliquant la théorie des perturbations à un problème classique [72,75] :

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{\ell}}{dt} &= - \frac{q^2 B^2}{4m} \vec{r} \times \vec{\rho} \\ \frac{d\vec{a}}{dt} &= + \frac{q^2 B^2}{4m^2} \sqrt{\frac{m}{-2E_0}} [(\vec{r} \times \vec{\rho}) \times \vec{p} + (\vec{r} \times \vec{p}) \times \vec{\rho}] \quad . \end{aligned} \quad (44)$$

Ici \vec{a} désigne le vecteur de Runge Lenz réduit en énergie (§. II.1.A.γ., Eq. (21)). La première équation montre que l_z est une constante du mouvement mais qu'il n'en est pas de même pour \vec{l} et \vec{a} . Au premier ordre, on peut moyenner les termes de droite des équations sur la trajectoire non perturbée d'énergie E_0 et on trouve aussi l'évolution des composantes de \vec{L} et \vec{a} . A l'aide de ces composantes, on peut construire un invariant valable au quatrième ordre en B près

$$\frac{d}{dt} \langle \Lambda \rangle = \frac{d}{dt} (4 \vec{a}^2 - 5 a_z^2) = 0 \quad . \quad (45)$$

Les trois quantités (E_0 , Λ et l_z) permettent de décrire quelles sont les modifications de l'ellipse de Képler sous l'influence du champ magnétique. Elles correspondent à des intégrales du mouvement approchées. Au cours de la déformation de l'ellipse $\langle \rho^2 \rangle$ reste constante et on peut montrer que [40, 75]

$$\langle \rho^2 \rangle = \frac{-1}{4m E_0} \left(\Lambda + l_z^2 - \frac{me^4}{2E_0} \right) \quad . \quad (46)$$

L'énergie totale, y compris le terme diamagnétique $\frac{1}{8m} B^2 q^2 \langle \rho^2 \rangle$, s'écrit alors dans le système international

$$E_D = E_0 - \frac{B^2 q^2}{32m^2 E_0} \left(\Lambda + l_z^2 - \frac{me^4}{2E_0} \right) \quad .$$

Si on utilise les unités atomiques et si, dans un modèle semi-classique, on quantifie les observables E_0 , l_z , Λ en y associant les valeurs propres $-2E_I \frac{1}{2n^2}$, $\hbar M$ et $\hbar^2 \lambda$ l'expression de l'énergie devient

$$E_D \text{ (u.a.)} = \frac{-1}{2n^2} + \frac{\gamma^2}{16} n^2 (\lambda + M^2 + n^2)$$

Cette approximation est valide si la période d'évolution T_1 des paramètres de l'ellipse est grande devant la période T_2 du mouvement de l'électron sur l'ellipse.

L'équation du mouvement du moment cinétique $\frac{d\vec{l}}{dt} = -\frac{q^2 B^2}{4m} (\vec{r} \times \vec{p})$ permet d'estimer la période T_1 , $\frac{d\vec{l}}{dt} \sim \gamma^2 n^4$ avec l de l'ordre de n , d'où $T_1 \sim \frac{1}{\gamma^2 n^3}$.

La période T_2 du mouvement de l'électron sur l'ellipse est l'inverse de la fréquence de Bohr ($\sim \frac{1}{n^3}$), le critère de validité est donc :

$$T_1 \gg T_2 \quad \text{soit} \quad \frac{1}{\gamma^2 n^3} \gg n^3 \quad \text{ou} \quad \gamma n^3 \ll 1 .$$

Cette approximation est donc valable dans tout le domaine "diamagnétique" et, dans ce cas, l'existence de l'invariant adiabatique Λ peut expliquer le "quasi-croisement" des multiplets de n différents observé dans les diagrammes (E, B^2) .

β - Approche quantique.

La description classique que nous venons de faire a été confirmée tout récemment par des calculs quantiques. Une approche utilisant la représentation du problème coulombien dans l'espace des moments sur l'hypersphère de Fock et les propriétés de symétrie du groupe $O(4)$ présentes dans l'atome non perturbé a été développée par Herrick en 1982 [17]. Une analyse reposant sur la théorie des groupes et utilisant les moments angulaires (\vec{J}_1, \vec{J}_2) adaptés à la description de l'atome d'Hydrogène isolé (cf. Chap. II.1.A. γ .) permet aussi de retrouver le résultat [34, 40, 75, 76]. Nous allons ici en rappeler les grandes lignes. Dans le sous-espace d'énergie $E_0 = \frac{-1}{2n^2}$, l'atome d'Hydrogène peut être entièrement écrit par l'ECOC $(J_1^2 = J_2^2, J_{1z}, J_{2z})$. Le problème est d'établir l'expression d'un invariant α ayant les mêmes propriétés de symétrie que l'opérateur ρ^2 . Or l'écriture sous forme tensorielle de ρ^2 fait apparaître des tenseurs de rang 0 et 2 dans l'espace orbital, c'est-à-dire les harmoniques sphériques $Y_{2,0}$ et $Y_{0,0}$ [2]. Ceci suggère d'écrire l'invariant $\alpha \equiv \rho^2$ comme fonction quadratique des composantes de \vec{J}_1 et \vec{J}_2 . Compte tenu des propriétés de symétrie de l'opérateur ρ^2 dans différentes transformations spatiales (inversion, réflexion par rapport aux plans $z=0$, $x=0$ et $y=0$ et $x=y$ premier bissecteur), on peut montrer que la forme la plus générale de cet invariant est donné par [76] :

$$\alpha \equiv \rho^2 = A (\vec{J}_1^2 + \vec{J}_2^2) + B (J_{1z}^2 + J_{2z}^2) + C \vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2 + D (J_{1z} + J_{2z}) .$$

Dans un sous espace d'énergie $E_0 = -\frac{1}{2n^2}$ (où $\vec{J}_1^2 = \vec{J}_2^2$ fixé) et de nombre quantique magnétique $M = J_{1z} + J_{2z}$ fixé, l'expression la plus générale de cet invariant est :

$$\alpha = \alpha_0 + A (J_{1z} \cdot J_{2z} + B \vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2) \quad (47)$$

et s'écrit en terme de \vec{L} et \vec{a}

$$\alpha = \alpha_1 \vec{L} + \alpha_2 \vec{a}^2 + \alpha_3 L_z^2 + \alpha_4 a_z^2 .$$

Pour déterminer les constantes α_0 , A et B (ou α_i , $i=3 \rightarrow 4$) les auteurs de la référence [76] ont considéré quatre orbites de Képler classique très fortement dégénérées : deux trajectoires rectilignes le long de Ox et de Oz (direction de \vec{B}) et deux trajectoires circulaires situées dans les plans $z=0$ et $x=0$. Connaissant pour ces quatre trajectoires les valeurs propres de \vec{L}^2 , L_z , a^2 et a_z^2 , ils ont déterminé les coefficients α_i ($i=1-4$).

L'invariant classique est alors identique à l'expression $\langle \rho^2 \rangle$ obtenue dans l'approche classique (Eq. (46)) :

$$\alpha = a_0^2 \times \frac{1}{2} n^2 \left(n^2 + \frac{1}{\hbar^2} L_z^2 + \frac{1}{\hbar^2} (4a^2 - 5a_z^2) \right) \quad (48)$$

(a_0 désigne le rayon de Bohr) il est équivalent aux résultats de Solov'ev [72]. On peut également exprimer cet invariant à l'aide des vecteurs \vec{J}_1 et \vec{J}_2 en utilisant les relations quantiques du §.II.1.A.γ. de ce chapitre (Eq. (22) et (24) en particulier). On obtient alors l'expression quantique de l'invariant :

$$\alpha = \rho^2 = a_0^2 \frac{1}{2} n^2 (3 n^2 - 4 M^2 + 20 J_{1z} \cdot J_{2z} - 8 \vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2 + 1) \quad (49)$$

Cette expression obtenue dans un calcul complètement quantique diffère de l'expression classique $\langle \rho^2 \rangle$ (Eq. (46)) par la présence du dernier terme (+1) dans la parenthèse de droite. L'expression, en unités atomiques, de l'énergie d'un niveau du sous espace n , M fixés s'exprime alors très simplement en tenant compte du terme diamagnétique $\frac{\gamma^2 \rho^2}{8}$:

$$E_{D(u.a.)} = \frac{-1}{2n^2} + \frac{\gamma^2}{16} n^2 (3 n^2 - 4 M^2 + 20 J_{1z} \cdot J_{2z} - 8 \vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2 + 1) \quad (50)$$

L'étude totalement quantique de l'effet diamagnétique, en particulier la démonstration de l'équation (49) est présentée dans l'Appendice 1 de la référence [33] ; pour cela l'auteur de la référence citée utilise l'équivalence entre l'Hamiltonien de l'atome d'Hydrogène isolé et celui représentant deux oscillateurs harmoniques à deux dimensions non couplés [77].

γ - Conséquences liées à l'existence d'un invariant :
mouvement de l'électron en présence de la perturbation
diamagnétique.

Revenons maintenant à l'analyse des résultats obtenus dans le formalisme classique et en particulier, étudions en quoi l'existence de l'invariant Λ permet d'apporter des informations sur les trajectoires de l'électron perturbé par l'effet diamagnétique. Nous nous plaçons toujours en champ faible pour n'avoir à considérer qu'un sous-espace (n, M) fixé .

Dans ce paragraphe nous utilisons les unités atomiques en se rappelant que Λ et \vec{a}^2 ont la même dimension que π^2 et que ρ^2 est homogène à a_0^2 . Durant la déformation de l'ellipse sous l'effet de l'interaction diamagnétique, $\langle \rho^2 \rangle$ reste invariant et l'énergie d'un niveau est donnée par [40]

$$E_D = \frac{-1}{2n^2} + \frac{\gamma^2}{16} n^2 (n^2 + L_z^2 + (4 \vec{a}^2 - 5 a_0^2)) \quad (51)$$

où
$$\begin{cases} \vec{a}^2 = n \vec{A} \\ \vec{L} \cdot \vec{a} = 0 \\ \vec{L}^2 + \vec{a}^2 = n^2 \end{cases} .$$

D'autre part $|\vec{a}| = n \epsilon$, ϵ étant l'excentricité de l'orbite. Donc, puisque $L_z^2 \leq L^2$, pour un niveau quantifié par M

$$-(n^2 - M^2) \leq \Lambda \leq 4 (n^2 - M^2)$$

$$0 < \frac{n^2}{2} M^2 \leq \rho^2 \leq \frac{n^2}{2} (5 n^2 - 3 M^2) \leq \frac{5}{2} n^4 .$$

Durant les lentes déformations de l'ellipse, la composante L_z de \vec{L} reste constante (Figure II.5) et

$$4x^2 + 4y^2 - z^2 = \Lambda = \text{cte} \quad .$$

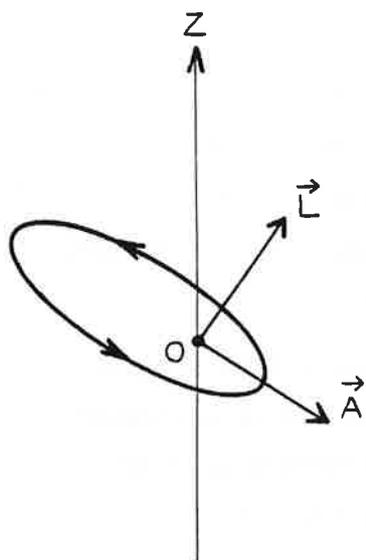
Ce déplacement est limité par la sphère $\vec{a}^2 = n^2 \epsilon^2$, soit $\vec{a}^2 \ll n^2$, il présente deux comportements différents suivant le signe de Λ :

- $\Lambda > 0$ (Figure II.5), la surface est un hyperboloïde à une nappe, \vec{a} est en moyenne localisé dans le plan $z=0$, le mouvement de l'électron est donc localisé essentiellement dans ce plan.

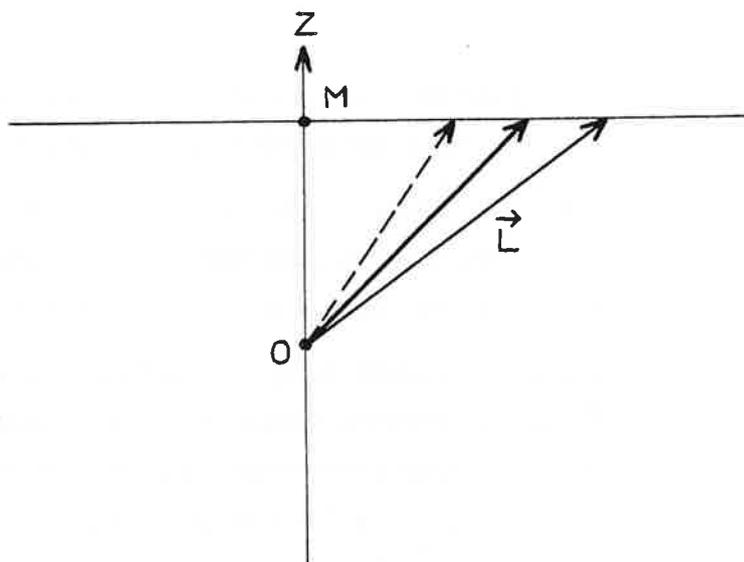
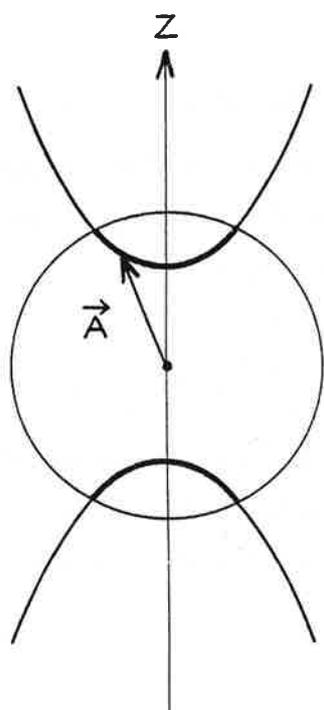
- $\Lambda < 0$ (Figure II.5), la surface est un hyperboloïde à deux nappes, \vec{a} est en moyenne localisé au voisinage de l'axe Oz et le mouvement de l'électron s'effectue essentiellement dans la direction du champ \vec{B} . Notons qu'à l'ordre de perturbation étudié, le vecteur \vec{a} n'est localisé que d'un seul côté du plan $z=0$; aucun couplage n'existant entre les mouvements associés à $a_z > 0$ ou $a_z < 0$ les états d'énergie correspondants sont quasi dégénérés.

Examinons les valeurs extrêmes de Λ pour une valeur de M fixée :

- Si l'on veut $\Lambda = 4a^2 - 5a_z^2$ maximal, on demande à a_z d'être le plus petit possible, à la limite nul. Dans ce cas, $a^2 = a_{\perp}^2 + a_z^2 \approx a_{\perp}^2$. La condition de liaison $L^2 + a^2 = n^2$ s'écrit, puisque $L_z^2 = M^2$:
 $M^2 + L_{\perp}^2 + a^2 = n^2$, a^2 maximal implique $L_{\perp}^2 = 0$ donc $L = |L_z| = |M|$ ce qui est cohérent avec la condition $\vec{a} \cdot \vec{L} = 0$. Puisque $L_{\perp}^2 = 0$, la trajectoire est localisée dans le plan $z=0$. Puisque $a^2 = n^2 - M^2$, a^2 diffère peu de n^2 pour de faibles valeurs de M^2 et l'excentricité de l'ellipse ϵ est voisine de l'unité ; la trajectoire est localisée au voisinage immédiat du demi grand axe de l'ellipse, et ceci d'autant plus que M^2 est plus petit. L'excentricité ϵ étant égale à
 $\epsilon = \sqrt{1 - \frac{L^2}{n^2}}$, les états propres correspondants sont associés à des faibles valeurs de $\frac{L}{n}$. Puisque Λ est maximum, $\langle \rho^2 \rangle$ est maximum et les états correspondants ont la plus forte énergie ; ils sont associés aux plus faibles valeurs du nombre quantique K (§. II.1.A.α.).

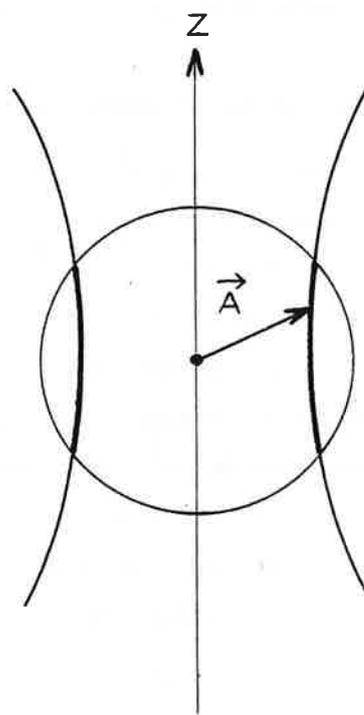


Ellipse de Kepler

Dans un espace M donné, $l_z = \text{cte}$ 

$$\Lambda \leq 0$$

Libration



$$\Lambda \geq 0$$

Rotation

Figure II.5 : Deux types de mouvements associés au signe de $\Lambda = 4\vec{\alpha}^2 - 5Q_z^2$

$\Lambda < 0$ Mouvement de libration (hyperboloïde à 2 nappes)

$\Lambda \geq 0$ Mouvement de rotation (hyperboloïde à 1 nappe) .

- Lorsque Λ est proche de sa valeur minimale $-n^2 + M^2$, la composante transverse \vec{a}_\perp est faible, alors que $|a_z|$ est grand, \vec{a} est donc proche de la direction de \vec{B} . L'ellipse a son demi grand axe approximativement dirigé dans la direction de \vec{B} et la trajectoire est localisée au voisinage immédiat de ce grand axe. Le moment cinétique \vec{L} , perpendiculaire à \vec{a} , est aussi perpendiculaire à \vec{B} . Dans ce cas $|M|$ est faible. Puisque $a^2 \sim a_z^2 \sim n^2$ l'excentricité de l'ellipse est forte. La trajectoire est une ellipse presque réduite à une droite, localisée au voisinage de l'axe Oz. Puisque $L^2 + a^2 = n^2$, $\frac{L}{n}$ est petit. Les états correspondants ont une énergie peu élevée, ils sont tels que $|M| \ll L \ll n$ et correspondent aux valeurs élevées de K. Les mouvements correspondant aux valeurs maximales de Λ (>0) et minimales de Λ (<0) sont donc de nature différente et s'apparentent aux valeurs de K faibles (resp. K élevés). Il en résulte en particulier que dans un espace (n, M) , ρ^2 est maximal pour l'état $|n, \rho=|M|, M\rangle$ et donc, dans le sous-espace de même parité que M, l'état $K=1$ a une composante importante sur $|n, M, M\rangle$.

L'existence de l'invariant Λ permet d'expliquer le comportement des niveaux dans la zone $\gamma n^3 \ll 1$. De plus, elle permet une description qualitative du problème du diamagnétisme en termes de trajectoires. Il est à remarquer que les mouvements pour le vecteur de Runge Lenz sont fondamentalement différents dans les cas $\Lambda > 0$ et $\Lambda < 0$: ces deux types de mouvement correspondent respectivement à un mouvement de rotation ($\Lambda > 0$) et à un mouvement de libration ($\Lambda < 0$). Les résultats de cette analyse classique sont en bon accord avec ceux obtenus par des méthodes de diagonalisation dans un sous-espace n, M fixés [79, 80], en particulier on peut interpréter l'existence de niveaux dégénérés d'énergie peu élevée et associés à des grandes valeurs de K.

De plus, des théories semi-classiques traitant l'interaction diamagnétique par la méthode des perturbations [16, 73, 74] permettent de retrouver les résultats décrits ci-dessus. Elles permettent de plus d'étudier l'influence sur le mouvement de la constante du mouvement M, ou plutôt de la valeur du rapport $\frac{|M|}{n}$. De plus, elles permettent de

trouver en tout point d'une trajectoire, étudiée dans le référentiel de Larmor, la relation entre la direction du vecteur \vec{a} et le rapport des variables d'action I_e/I_m associées aux constantes du mouvement l et n . Ainsi on retrouve que la valeurs maximum de $\langle \rho^2 \rangle$, soit $\frac{n^2}{2} (5 n^2 - 3 M^2)$ correspond bien à une trajectoire classique, ellipse d'excentricité maximum située dans le plan $z=0$ et associée à la valeur L minimale (Réf. [16], Eq. (2.16)). D'autre part les orbites circulaires correspondent à $\vec{a}^2=0$, soit $\Lambda=0$; elles ont donc pour énergie $E_S = \frac{\gamma^2}{16} n^2 (n^2 + M^2)$ et sont telles que $\vec{L}^2 = n^2$ (Réf. [16], Eq. (2.17)). Lorsque $|\frac{M}{n}| < 5^{-1/2}$ cette énergie E_S correspond à la transition entre le mouvement de libration qui apparaît pour $E < E_S$ et le mouvement de rotation associée à des énergies $E > E_S$. Lorsque $|\frac{M}{n}| > 5^{-1/2}$, seul apparaît le mouvement de rotation.

L'étude de l'effet diamagnétique en champ faible ($\gamma n^3 \ll 1$), en particulier l'analyse des mouvements de libration et de rotation pour les différents états K , est actuellement dans une phase intense d'investigation comme le montrent les nombreuses références récentes figurant dans ce manuscrit.

2. Zone de quasi-Landau (ou zone intermédiaire).

Dans ce domaine d'énergie, qui s'étend de part et d'autre de la limite d'ionisation en champ nul, l'énergie coulombienne et l'énergie diamagnétique sont d'une intensité comparable, interdisant tout traitement par perturbation. Il faut donc étudier l'Hamiltonien total H_R (Eq. ()) ce qui rend impossible toute prédiction théorique précise.

Expérimentalement, les spectres observés par Garton et Tomkins [21] et bien d'autres depuis [7, 24, 31, 33, 34, 38-42, 65, 81, 82] révèlent un comportement particulier dans cette zone [$E \approx 0$]: l'intensité du signal présente des modulations dont la fréquence est proportionnelle à ω_c . Elle décroît régulièrement quand l'énergie croît, vaut approximativement $\frac{3}{2} \pi \omega_c$ à la limite d'ionisation en champ nul et évolue lentement vers l'écart $\pi \omega_c$, ce qui correspond à l'écart entre deux niveaux

de Landau. Ces résonances ont ainsi reçu le nom de résonance de "quasi-Landau".

Les physiciens ont cherché une théorie approchée simple permettant d'expliquer ces phénomènes. Les premiers essais s'apparentent au traitement semi-classique que nous avons décrit au paragraphe I.3. du deuxième chapitre et qui prévoit une loi de quantification interprétant qualitativement les résonances [22]. Mais cette approche supposait un mouvement circulaire, dans le plan $z=0$ et ne tenant pas compte de la séparabilité du mouvement en φ , que traduit le bon nombre quantique M . Le modèle peut donc être quelque peu amélioré, avec des approximations moins restrictives.

A - Modèle semi-classique.

Rappelons l'expression de l'équation de Schrödinger écrite en coordonnées cylindriques dans le sous-espace M fixé et en unités atomiques (§. II.3.B., eq. ()) :

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \left(2E_D - \frac{M^2}{\rho^2} + \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} - \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 \right) \Psi = 0$$

La fonction propre Ψ ne dépend que des variables ρ et z . Nous savons que les états très excités de l'électron sont en général bien décrits par les méthodes semi-classiques ; mais ces méthodes ne sont d'application simple que pour les problèmes séparables conduisant à des qualifications unidimensionnelles.

Ici le problème est bidimensionnel (ρ, z) et non séparable. C'est pourquoi nous ne pouvons développer qu'un modèle approché utilisant des hypothèses simplificatrices.

L'idée est de considérer que le mouvement reste confiné dans le plan $z=0$, hypothèse qui s'est avérée satisfaisante et qui permet de rendre le problème unidimensionnel [20, 22, 24, 83].

Ecrivons l'équation de Schrödinger en coordonnées cylindriques en supprimant tous les termes dépendant de z en posant $z=0$ et en faisant le changement $\Psi(\rho, z=0) = \rho^{-1/2} \varphi(\rho)$.

On obtient :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \rho^2} + \left(\frac{2}{\rho} - \frac{M^2 - 1/4}{\rho^2} - \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 + 2E_D \right) \varphi = 0 \quad (52)$$

Nous pouvons appliquer la méthode de quantification WKB [84] usuelle à ce mouvement en ρ , en utilisant le système d'unités atomiques.

L'énergie potentielle $V(\rho)$ et le moment p_ρ s'écrivent :

$$\begin{cases} V(\rho) = -\frac{1}{\rho} + \frac{M^2 - 1/4}{2\rho^2} + \frac{1}{8} \gamma^2 \rho^2 \\ p_\rho = \sqrt{2[E_D - V(\rho)]} = \sqrt{2E_D + \frac{2}{\rho} - \frac{M^2 - 1/4}{\rho^2} - \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2} \end{cases} \quad (53)$$

Dans la méthode WKB usuelle ρ varie de $-\infty$ à $+\infty$ et les conditions aux limites sont $\varphi(-\infty) = \varphi(+\infty) = 0$. Ici ρ varie dans l'intervalle $[0, +\infty]$ et les conditions aux limites sont $\varphi(0) = \varphi(+\infty)$. Cette difficulté peut être contournée en ajoutant à l'énergie potentielle le terme $\frac{1}{8\rho^2}$ exprimé en unité Hartree ($2 \times E_I$) [85].

Si l'on désigne par ρ_1 et ρ_2 les valeurs de ρ aux points de rebroussement du mouvement classique, c'est-à-dire aux points où $E = V(\rho_1) = V(\rho_2)$, la quantification WKB s'écrit :

$$\int_{\rho_1}^{\rho_2} p_\rho \, d\rho = \left(n_\rho + \frac{1}{2} \right) \pi \quad (54)$$

où n_ρ est un entier positif que l'on peut appeler nombre quantique cylindrique. Il est égal au nombre de noeuds de la fonction propre $\varphi_{n_\rho}(\rho)$ associée à la valeur propre de l'énergie $E_D(n_\rho)$.

Dans le cas extrême, où le potentiel coulombien est nul, ou bien, pour un champ magnétique superintense, l'intégrale est calculable exactement et conduit à

$$E_D = \gamma \left(n_\rho + \frac{1}{2} + \frac{|M|}{2} \right) .$$

Rappelons que la constante γ qui apparaît en unités atomiques n'est autre que $\frac{\hbar\omega_c}{2E_I}$. On pourra donc écrire dans le système SI

$$E_D = \hbar\omega_c \left(n_\rho + \frac{1}{2} + \frac{|M|}{2} \right).$$

Si l'on tient compte du terme paramagnétique $\frac{+\gamma M}{2}$ on trouve donc :

$$E_D = \gamma \left(n_\rho + \frac{1}{2} + \frac{|M|}{2} \right) + \gamma M = \gamma \left(n_\rho + \frac{1}{2} + \frac{|M|+M}{2} \right),$$

ce qui est exactement l'énergie quantique des niveaux de Landau pour un électron sans spin (en négligeant seulement le terme $p_z^2/2m$).

Ce résultat était prévisible, compte tenu de ce que notre traitement WKB possède une symétrie cylindrique et sépare les mouvements en ρ et z de la même façon que le traitement des niveaux de Landau (§.II.1.B.β.).

Dans le cas extrême où le potentiel diamagnétique est nul ($\gamma=0$), l'intégrale est aussi calculable exactement et on trouve :

$$E_D = \frac{-1}{2 \left(n_\rho + |M| + \frac{1}{2} \right)^2} \quad \text{pour } \gamma=0.$$

L'apparition au dénominateur d'un nombre quantique demi-entier est en parfait accord avec le fait que l'approximation utilisée nous a conduits à étudier l'analogie de l'atome d'Hydrogène dans un espace à deux dimensions ; dans ce cas l'énergie ne dépend que du nombre quantique principal $n = n_\rho + |M| + 1$ et est donnée par :

$$E = - \frac{1}{2(n-1/2)^2} \quad [86].$$

Plusieurs auteurs ont essayé de retrouver dans le cas limite $\gamma=0$ les énergies de l'atome d'Hydrogène dans un espace à trois dimensions. Ainsi il est possible de modifier le terme d'énergie potentielle centrifuge M^2/ρ^2 et de le remplacer par $(|M| + 1/2)^2/\rho^2$ [41]. On retrouve alors l'énergie de l'atome d'Hydrogène en effectuant la substitution $|M| + 1/2 \rightarrow l + 1/2$ et le nombre quantique principal n est donné par $n = n_\rho + l + 1$. Cependant, ce remplacement $|M|^2 \rightarrow (|M| + 1/2)^2$

ne permet pas de retrouver l'énergie des niveaux de Landau [63].

Le cas $M=0$ est un peu particulier car le point de rebroussement intérieur correspond à $\rho_1=0$. De plus, suivant la parité Π_z étudiée, la probabilité de trouver l'électron dans le plan $z=0$ présente un maximum ($\Pi_z=1$) ou au contraire est nulle ($\Pi_z=-1$). Le modèle que nous venons de décrire s'applique tout spécialement aux états $\Pi_z=1$ soit $(-1)^{\ell+|M|} = 1$, puisque nous nous sommes restreint à étudier le mouvement dans le plan $z=0$.

La méthode semi-classique permet d'obtenir simplement certaines informations sur les niveaux d'énergie, en particulier dans la zone $E \sim 0$. En effet l'intégrale apparaissant dans la relation de quantification (Eq. ()) peut être calculée exactement à l'aide d'intégrales elliptiques [87]. De plus, il est possible de calculer l'écart entre deux niveaux consécutifs :

$$\frac{dE_D}{dn_\rho} = \pi \left[\int_{\rho_1}^{\rho_2} \frac{1}{p_\rho} d\rho \right]^{-1} . \quad (55)$$

Au voisinage de la limite d'ionisation en champ nul $E_D=0$ et si $n_\rho \gg |M|$, on a $\frac{dE_D}{dn_\rho} \sim 1,5 \pi \omega_c$; quand l'énergie croît, $\frac{dE_D}{dn_\rho} \rightarrow \pi \omega_c$, ce qui correspond bien aux états de Landau. De plus, dans ce cas,

$$(n_\rho + 1/2) \sim 1,16 \gamma^{-1/3} \quad (56)$$

ce qui donne une loi du type $B n^3 = \text{cte}$ [20, 36].

Des études plus détaillées ont permis d'obtenir des expressions analytiques simples donnant l'écart d'énergies entre deux niveaux de quasi-Landau, couvrant tout le domaine d'énergie $E \leq 0$ et $E \geq 0$ et valables quelle que soit la valeur du nombre quantique M ($M=0$ et $M \neq 0$) [88, 89].

Cette méthode de quantification a permis à de nombreuses équipes d'interpréter les modulations de leurs spectres expérimentaux [7, 24,

34, 38 → 42, 63, 81, 82]. Son inconvénient principal est qu'elle permet de ne déterminer qu'un seul niveau pour chaque valeur n_p . Elle ne permet pas, par conséquent, de rendre compte des sous-structures observées dans ces modulations au cours d'expériences utilisant une meilleure résolution optique. Ainsi, par exemple, une expérience effectuée en cellule sur les états $|M|=3$ du césium - expérience dans laquelle on détecte les états qui ont une énergie fixée, mais où on fait varier l'intensité du champ magnétique - montre que les résonances de quasi Landau présentent une structure compliquée où apparaît un grand nombre de raies très étroites dans le domaine $E < 0$ et s'élargissant pour $E > 0$ [39]. Une autre expérience faite à haute résolution sur un jet atomique de Sodium, montre qu'il existe de nombreuses résonances très étroites s'étendant de part et d'autre de $E=0$ [82]. Les modulations observées dans les spectres de quasi-Landau semblent par conséquent correspondre à la superposition de plusieurs séries de quasi-Landau, les écarts entre deux résonances d'une même série différant peu d'une série à l'autre. Notons que dans la référence [82], des résonances étroites ont été observées au voisinage de $E=0$, aussi bien pour les états $\Pi_z = (-1)^{\ell+|M|} = 1$, qui ont un maximum de probabilité de présence dans le plan $z=0$, que pour les états $\Pi_z = -1$ pour lesquels la probabilité de présence dans le plan $z=0$ est nulle ; de plus, pour une intensité donnée du champ B , la périodicité observée dans ces deux spectres est la même. Cependant, dans les spectres $\Pi_z = +1$, il existe un petit nombre de raies très intenses, celles-ci ayant des énergies différant peu de la valeur obtenue dans le modèle semi-classique (Eq. ()). Par contre toutes les raies des spectres $\Pi_z = -1$ ont des intensités comparables, si bien que ces spectres semblent ne posséder aucune structure lorsqu'ils sont observés à basse résolution ou lorsque l'effet Stark motionnel est suffisamment important pour mélanger les différentes raies. Des calculs numériques incluant dans une méthode de diagonalisation les effets du continuum (cf. §. III.B.α.), ont permis de confirmer ces résultats expérimentaux [67 - 68].

La méthode semi-classique développée dans ce paragraphe ne permet d'étudier que les seuls états localisés dans le plan $z=0$ et ayant une

grande excitation en ρ (n_ρ grand). L'étude de la distribution de probabilité de présence des fonctions d'onde pour des états $K=1$, $\Pi_z = +1$ pas trop excités ($E < 0$) (ce qui permet d'utiliser des méthodes de diagonalisation), montre que ces états sont essentiellement localisés au voisinage du plan $z=0$ [7]. De plus les énergies calculées pour ces états $K=1$, $\Pi_z = +1$ diffèrent peu selon la méthode utilisée (diagonalisation ou semi-classique). Enfin, ces états $K=1$, $\Pi_z = +1$ sont souvent fortement favorisés par l'excitation optique (grande force d'oscillateur pour la transition étudiée). Tout ceci justifie a posteriori que les résonances de quasi-Landau observées expérimentalement pour des états $\Pi_z = +1$ aient pu être interprétées par la méthode semi-classique en étudiant le mouvement dans le plan $z=0$ pour des états de forte excitation en ρ , donc de grande énergie diamagnétique. Ces états de quasi-Landau sont donc bien le prolongement à énergie croissante des états $K=1$.

Un traitement quantique plus élaboré permet de tenir compte du mouvement de l'électron dans la direction de \vec{B} . Dans une approximation adiabatique, l'énergie E_z associée à ce mouvement permet d'interpréter les sous-structures des résonances de quasi-Landau [90]. Nous ne viendrons sur ce point que dans le paragraphe III.3..

B.- Lois d'échelle.

Pour interpréter les modulations observées dans la zone de quasi-Landau et l'existence d'anticroisements très étroits dans un sous-espace (M, Π_t) fixés [65], certains auteurs ont choisi une démarche totalement différente de la méthode semi-classique du paragraphe A précédent. La mise en évidence dans la zone diamagnétique d'une symétrie dynamique approchée (§. III.1.C.) permet de suivre de façon "diabatique" les niveaux caractérisés par les nombres quantiques introduits dans la zone diamagnétique (Π_t , M , n et K). Par continuité ces niveaux "diabatiques" correspondent aux résonances de quasi-Landau. On peut montrer que l'énergie de ces niveaux "diabatiques" suit une loi d'échelle simple, valable depuis la zone diamagnétique jusqu'à la zone des champs super-intenses [91].

Cette approche suppose, comme précédemment, un mouvement de l'électron localisé dans le plan $z=0$. Dans la zone diamagnétique, on peut écrire en unités atomiques

$$E_D = -\frac{1}{2n^2} + \frac{1}{8} \gamma^2 \langle \rho^2 \rangle$$

et prendre pour les niveaux $K=1$, $\langle \rho^2 \rangle = n^4 \frac{5}{2}$, soit :

$$E_D = -\frac{1}{2n^2} + \frac{1}{8} \gamma^2 n^4 \times \frac{5}{2} = \frac{1}{n^2} \left[-\frac{1}{2} + \frac{5}{16} (\gamma n^3)^2 \right] \quad (57)$$

Dans la zone de très fort champ magnétique, les calculs de Angelie et Deutsch [92, 93], partant de l'équation de Dirac [4], ont montré que l'énergie des états était donnée par

$$E_D = n \gamma - (c \frac{\gamma}{n})^{1/2} = \frac{1}{n^2} [\gamma n^3 - (c \gamma n^3)^{1/2}] \quad (58)$$

On remarque alors que la quantité $n^2 E_D$ ne dépend dans les deux cas, que de $\beta = \gamma n^3$, terme dont nous avons déjà souligné l'importance dans notre approche classique. Il est donc cohérent de penser que, dans la zone de quasi-Landau, une expression de l'énergie pourrait être donnée par

$$E_D n^2 = f(\beta) \quad , \quad (59)$$

la fonction f s'adaptant asymptotiquement aux deux cas extrêmes précédemment cités (Eq. (57) et (58)). Choissant une forme analytique simple, ne dépendant que d'un seul paramètre, celui-ci peut être optimisé en étudiant les nombreux résultats expérimentaux contenus dans les références [7, 39, 82].

La fonction

$$f(\beta) = (\beta^2 + \frac{3}{2} \beta + \frac{9}{4})^{1/2} - (2\beta + 4)^{1/2}$$

proposée par S. Feneuille [91], conduit à des résultats très voisins de ceux obtenus par la méthode semi-classique (§. III.2.A.) et permet, en particulier, de retrouver les équations (57) et (58). Gallas, Gerck et O'Connell, dans un article récent [94], ont montré qu'un tel résultat (Eq. (59)) pouvait être justifié en représentant l'Hamiltonien sous une

forme diagonale et en appliquant le principe variationnel à cette nouvelle représentation. Les énergies des états E_{n_ρ} , associées au nombre quantique radial n_ρ , apparaissent alors sous une forme analytique simple []. L'approche utilisée dans la référence [94] permet de plus d'introduire le nombre quantique M dans la formule donnant la loi d'échelle. Enfin, soulignons que le terme $\frac{M^2}{\rho^2}$ intervenant dans l'énergie ne fait pas varier sensiblement la position des niveaux pour $|M|$ faible car ce terme est important seulement pour les valeurs de ρ faible ; or, la quantification fait intervenir principalement les grandes valeurs de ρ .

Conclusion.

Bien que l'on cherche à affiner de plus en plus les approches de type WKB ou de lois d'échelles, ces méthodes sont impuissantes dès qu'il s'agit d'interpréter les sous-structures des modulations. En fait, il faudrait développer une théorie semi-classique à trois dimensions pour ce problème non séparable (Les travaux de Fano vont dans ce sens, mais nous sommes encore loin d'une théorie complète).

3. Zone de champ très intense. Sous-structure des résonances de quasi-Landau.

Quand le champ magnétique devient suffisamment important pour que le mouvement de l'électron soit essentiellement dominé par l'interaction diamagnétique, on peut alors traiter l'interaction coulombienne en perturbation.

Dans le cas d'un champ magnétique superintense, les états de base d'ordre 0 sont alors les états de Landau pour le mouvement en ρ et correspondent à un mouvement libre de l'électron suivant la direction Oz (cf. §. II.3.E.). Le potentiel coulombien $\frac{-e^2}{\sqrt{\rho^2+z^2}}$ va limiter le mouvement axial en perturbant très peu le mouvement transversal dominé par la présence du fort champ magnétique [44 - 55].

Un tel traitement s'apparente à une approximation adiabatique : la fréquence caractéristique du mouvement transversal est très proche de la fréquence cyclotron, elle est très supérieure à la fréquence du mouvement axial caractéristique de l'interaction coulombienne.

Dans l'approximation de Born Oppenheimer en physique moléculaire [84] on traite le mouvement des électrons en fixant la distance R entre les noyaux, les énergies propres électroniques dépendent alors de R : $\varepsilon_n(R)$. On traite ensuite pour un état électronique donné, le mouvement des électrons dans ce potentiel $\varepsilon_n(R)$; on en déduit la quantification vibrationnelle de leur mouvement et l'énergie totale du système.

Pour des champs très intenses, c'est-à-dire dans le domaine correspondant aux états de quasi-Landau, on peut introduire une autre approximation, également de type adiabatique. L'Hamiltonien d'ordre zéro ne sera plus l'Hamiltonien H_{\perp} (Eq. (26)), mais sera l'Hamiltonien diamagnétique H_D (Eq. (30)) faisant intervenir les variables ρ et z . C'est alors le mouvement transverse de l'électron (mouvement en ρ) qui est traité en fixant la coordonnée z . Les énergies transverses dépendent de z : $\varepsilon_{n\rho}(z)$. On traite ensuite le mouvement en z de l'électron dans le potentiel $\varepsilon_{n\rho}(z)$ et on en déduit l'énergie totale transverse + axiale de l'électron [90].

Les deux modèles (champs superintenses et champs très intenses) sont très analogues et nous pouvons développer un formalisme semblable. Cependant notons que, si dans le cas des champs superintenses il existe des méthodes de résolution analytique, seules des solutions numériques sont envisageables pour des champs très intenses.

Pour une valeur fixée de z , les états propres $\varepsilon_{n\rho}(z)$ associés aux fonctions propres $\varphi_{n\rho}(\rho, z)$, où z est un paramètre, sont solutions de l'équation écrite en unités atomiques dans un sous-espace M fixé :

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \varphi_{n\rho}(\rho, z) \right) + \left(-\frac{M^2}{\rho^2} + \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} - \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 + 2 \varepsilon_{n\rho}(z) \right) \varphi_{n\rho}(\rho, z) = 0 .$$

(60)

La solution générale Ψ de l'équation $H_D \Psi_v = E_{D,v} \Psi_v$ peut être cherchée sous la forme

$$\Psi_v = \sum_{n_p} \chi_{n_{p,v}}(z) \varphi_{n_p}(\rho, z) \times \frac{e^{iM\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (61)$$

où $\chi_{n_{p,v}}(z)$ est solution du système d'équations différentielles couplées

$$\begin{aligned} \sum_{n_p} \left[\frac{d^2}{dz^2} \chi_{n_{p,v}}(z) - 2 \varepsilon_{n_p}(z) \chi_{n_{p,v}}(z) \right] \varphi_{n_p}(\rho, z) \\ + \sum_{n_p} \left[\chi_{n_{p,v}}(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi_{n_p}(\rho, z) + 2 \frac{d}{dz} \chi_{n_{p,v}}(z) \frac{\partial}{\partial z} \varphi_{n_p}(\rho, z) \right] \\ = - 2 E_{D,v} \sum_{n_p} \chi_{n_{p,v}}(z) \varphi_{n_p}(\rho, z) \end{aligned}$$

L'approximation adiabatique consiste à ne garder qu'un seul terme n_{p_0} dans l'expression de la fonction d'onde totale Ψ . Si, de plus, on peut négliger les variations en z de la fonction $\varphi_{n_{p_0}}(\rho, z)$, le second terme du premier membre de l'équation ci-dessus disparaît. On se ramène au problème simple consistant à étudier les états propres d'énergie totale $E_{D,v}$ d'une particule soumise au potentiel à une dimension $\varepsilon_{n_{p_0}}(z)$

$$\frac{d^2}{dz^2} \chi_{n_{p_0,v}}(z) + 2 (E_{D,v} - \varepsilon_{n_{p_0}}(z)) \chi_{n_{p_0,v}}(z) = 0 .$$

Notons que, compte tenu du fait que z apparaît sous une forme quadratique dans l'équation (60), le potentiel effectif $\varepsilon_{n_{p_0}}(z)$ est une fonction paire en z

$$\varepsilon_{n_{p_0}}(z) = + \varepsilon_{n_{p_0}}(-z) .$$

Ce potentiel $\varepsilon_{n_{p_0}}$ présente un minimum en $z=0$, ce minimum étant égal à la valeur obtenue pour l'énergie diamagnétique des états $K=1$ dans le paragraphe III.2.A. (Eq. (53)), où l'on étudiait le mouvement en ρ dans le plan $z=0$. D'autre part, quand $|z| \rightarrow +\infty$, $\varepsilon_{n_{p_0}}(z)$ tend

vers la valeur propre de l'état de Landau (Eq. (27)) puisque $\frac{1}{\rho^2+z^2}$ devient négligeable

$$\varepsilon_{n\rho_0}(z) \xrightarrow{|z| \rightarrow +\infty} \gamma \left(n_{\rho_0} + \frac{1}{2} + \frac{|M|}{2} \right) .$$

Au voisinage du minimum de la courbe de potentiel $\varepsilon_{n\rho_0}(z)$, $\frac{\partial}{\partial z} \varphi_{n\rho_0}(\rho, z)$ et $\frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi_{n\rho_0}(\rho, z)$ sont en module négligeables. Le modèle décrit ci-dessus est particulièrement valable pour les états peu excités du puits de potentiel $\varepsilon_{n\rho_0}(z)$. Les états propres $E_{D,v}$ seront, en première approximation, identiques aux états d'un potentiel harmonique et l'énergie aura pour expression (u.a.)

$$E_{D,v} \sim \varepsilon_{n\rho_0}(0) + \bar{\omega}_z \left(v + \frac{1}{2} \right) \quad v \geq 0 \quad (62)$$

$\omega_z = \frac{m e^4}{\hbar^3} \bar{\omega}_z$ est la pulsation du mouvement de vibration dans la direction parallèle au champ magnétique et, en unités atomiques :

$$\bar{\omega}_z^2 = \left. \frac{\partial^2}{\partial z^2} \varepsilon_{n\rho_0}(z) \right|_{z=0} .$$

Les états propres $\chi_{n\rho_0,v}(z)$ sont soit symétriques, soit antisymétriques dans l'opération de symétrie $z \rightarrow -z$ suivant la valeur de v

$$\Pi_z = (-1)^v .$$

Dans un sous-espace M fixé, on observe des états équidistants en première approximation et dans lequel états pairs $\Pi_t=1$ et impairs $\Pi_t=-1$ alternent. Ce résultat permet d'interpréter la structure observée en régime diamagnétique pour les états les plus excités d'une multiplicité n fixé [79].

Bien sûr l'approximation adiabatique ne peut être valable que lorsque $\bar{\omega}_z \ll \gamma$ soit $\omega_z \ll \omega_c$.

Dans la zone de quasi-Landau $E \sim 0$, les résonances de quasi-Landau définies par les nombres quantiques M et n_ρ présentent donc une sous structure liée au mouvement vibrationnel dans la direction Oz et caractérisée par les nombres quantiques v et Π_z .

Chapitre III

MONTAGE EXPERIMENTAL

Le choix de notre montage expérimental a été guidé par les différentes expériences qui ont été réalisées durant ces dix dernières années sur le sujet ; aussi, avant d'entreprendre sa description détaillée, nous analyserons les conditions expérimentales de ces expériences et nous justifierons notre propre choix.

I - Expériences antérieures.

Les expériences réalisées sur les atomes de Rydberg en présence de champ magnétique ne sont pas très nombreuses, nous les avons présentées dans le tableau , où sont précisés la nature de l'atome, les conditions dans lesquelles il est étudié, la méthode d'excitation, le type de détection et l'intensité des champs magnétiques utilisés.

Notre but est de mettre en évidence les avantages et les inconvénients de tel ou tel choix expérimental.

Les différents résultats de ces expériences ont été ou seront rappelés dans les chapitres II et IV.

Nous constatons que la plupart des expériences ont été faites en cellule, seule une a été réalisée sur jet atomique. L'avantage de la cellule est la forte densité des atomes, ce qui compense les faibles forces d'oscillateurs des transitions entre le niveau fondamental et les niveaux excités. Par contre la répartition spatiale isotrope des vitesses dans la cellule est la source d'inconvénients :

1) L'effet Doppler (qui peut être supprimé si on peut mettre en oeuvre une méthode de spectroscopie à deux photons)

2) Le champ électrique motionnel propre au problème en champ magnétique, perpendiculaire à celui-ci. La présence de ce champ supplémentaire d'intensité variable suivant l'orientation et l'intensité de la vitesse de l'atome ne peut que compliquer une étude déjà difficile.

Dans un jet atomique par contre on sélectionne une direction particulière de la vitesse des atomes, ce qui permet en excitant perpendiculairement à cette direction de supprimer l'effet Doppler. De plus en choisissant l'orientation du champ magnétique par rapport à la direction du jet atomique, on pourra soit diminuer très fortement le champ électrique motionnel (\vec{B} parallèle au jet atomique), soit étudier plus particulièrement ses effets (\vec{B} perpendiculaire au jet atomique). Ces avantages sont très séduisants, mais ce choix possède aussi quelques inconvénients.

La densité des atomes est beaucoup plus faible dans un jet que dans une cellule, aussi il est nécessaire d'avoir une excitation optique et une détection des niveaux très efficaces. Cela entraîne la mise en oeuvre de sources laser assez intenses dans des domaines de fréquences pas toujours aisés à atteindre, ainsi que la mise au point de méthode de détection très sensible. Dans le cas particulier des états de Rydberg, il en existe une qui a depuis longtemps fait ses preuves : la méthode de détection par ionisation par champ électrique.

Dans les expériences antérieures, nous pouvons constater que la résolution des spectres est toujours limitée soit parce que l'expérience a été faite en cellule (effet Doppler, champ électrique motionnel), soit parce que, étant faite sur jet atomique, elle nécessite des puissances qui ne

GROUPES	ATOME	LUMIERE EXCITATRICE	DETECTION	AIMANT
Garton et Tomkins (Argonne) [21]	Cellule vapeur de Ba	Spectres en absorption. Spectrographe de résolution 0,02 cm ⁻¹ . Polarisation II ou σ	Plaques photosensibles	Electro-aimant < 2,5 T
Fonck, Roesler, Tracy, Wright (Wisconsin) Tomkins [38]	Vapeur de Ba I et Sr I	Excitation à deux étages par laser pulsé de largeur spectrale 0,06 cm ⁻¹ (~ 2 GHz)	Détection par charge d'espace. Diode thermoionique	Aimant supraconducteur < 4 T
N.P. Economou, R.R. Freeman, P.F. Lioo (Bell Laboratories) [41]	Cellule vapeur de Rb	Excitation à deux étages ou doublement dans KDP pour une excitation à un étage, par un laser pulsé. Largeur spectrale 0,1 cm ⁻¹ (~ 3,3 GHz)	Diode thermoionique	Solénoïde supraconducteur < 5 T
K.T. Lu, F.S. Tomkins, H.M. Crosswhite, H. Crosswhite (Argonne Laboratories) [81]	Cellule vapeur de Li, Na, Ba I, Sr I	Spectres en absorption. Polarisation σ ⁺ . Largeur spectrale 0,02 cm ⁻¹ (~ 800 MHz)	Plaques photosensibles	Solénoïde supraconducteur < 4,7 T
J.B. Castro, M.L. Zimmerman, R.G. Hulet (MIT) R.R. Freeman (Bell Laboratories) [65]	Jet atomique de Na	Excitation pulsée à deux étages. Largeur spectrale 0,15 cm ⁻¹ (~ 5 GHz)	Détecteur à barrière de surface nécessitant une accélération des électrons (~ 10 keV)	Solénoïde supraconducteur < 5,7 T
J.C. GAY, D. Delande Pendrill [39]	Cellule vapeur de Cs	Excitation à un étage à partir d'un état excité obtenu grâce à un processus moléculaire. Laser à colorant continu de largeur spectrale 10 MHz.	Diode thermoionique	Solénoïde supraconducteur

peuvent être obtenues qu'à l'aide de sources pulsées qui sont en général de résolution spectrale médiocre.

En ce qui concerne la méthode d'excitation seules les expériences par absorption et spectroscopie conventionnelle correspondent à un schéma d'excitation à un étage. Les autres expériences effectuées en spectroscopie laser répondent à un schéma d'excitation à plusieurs étages.

Pour exciter les atomes alcalins directement à partir de leur état fondamental vers les états très excités, il faut une longueur d'onde qui se situe dans le proche ultraviolet (ultraviolet lointain pour l'hydrogène). Des sources lasers accordables dans l'ultraviolet ne sont pas obtenues directement mais nécessitent un doublage ou triplage de fréquence dans des cristaux non linéaires. De tels procédés supposent une grande puissance de la source lumineuse initiale pour obtenir un bon rendement de conversion.

L'autre choix est l'excitation à plusieurs étages et couramment à deux étages. Pour les alcalins, on excite l'état S du fondamental vers un état P relais, puis on explore à partir de ce niveau les états excités. Une complication de cette méthode est l'asservissement de la fréquence laser sur celle de la première transition (le niveau relais se déplaçant avec l'intensité du champ magnétique). Bien sûr le choix de telle ou telle méthode est dicté par le type de niveaux finals que l'on désire observer, l'excitation à un étage permet d'atteindre les niveaux de caractère P, alors qu'à deux étages ce sont les niveaux de caractère S et D qui sont atteints. La sélection peut s'opérer aussi par les polarisations des lumières excitatrices.

Dans la référence [39], le procédé d'excitation est un processus moléculaire à deux photons appelé "résonance hybride", il permet en particulier d'atteindre les niveaux nF.

Les détecteurs les plus souvent utilisés dans les expériences en cellule sont basées sur l'ionisation par collisions des niveaux très excités. Les ions formés passant dans la charge d'espace d'une diode thermique modifient celle-ci et on enregistre un courant aux bornes de la diode.

Le détecteur utilisé pour l'expérience sur jet [65] est un détecteur à barrière de surface, que nous décrirons plus en détail puisque nous avons

choisi une détection semblable pour notre dispositif.

Les expériences que nous avons citées, ont porté principalement sur les atomes alcalins (Li, Na, Rb, Cs) et sur les alcalino-terreux (Ba, Sr). Pour faciliter les comparaisons théoriques, les expériences sur l'hydrogène étant encore très difficiles technologiquement, les alcalins, n'ayant qu'un seul électron sur leur couche externe se prêtent très bien à des modèles quasi hydrogénoïdes.

Mais les états que l'on excite optiquement ont un moment cinétique faible et un défaut quantique important en champ nul. Ces états sont donc non hydrogénoïdes et il peut être intéressant pour faciliter encore les interprétations théoriques de n'exciter que des états de défauts quantiques faibles, c'est-à-dire de choisir les alcalins les plus proches de l'hydrogène (Li, Na), ou d'atteindre des niveaux de caractère l élevé (états F du césium).

II - Justification de notre choix.

Dans notre expérience, les atomes d'un jet atomique de lithium sont excités par une impulsion laser, dans une région où règne un champ magnétique statique uniforme intense.

L'atome est porté depuis son état fondamental vers des états d'énergie voisins de la limite d'ionisation en champ magnétique nul, par absorption d'un seul photon ultraviolet.

1. Le lithium.

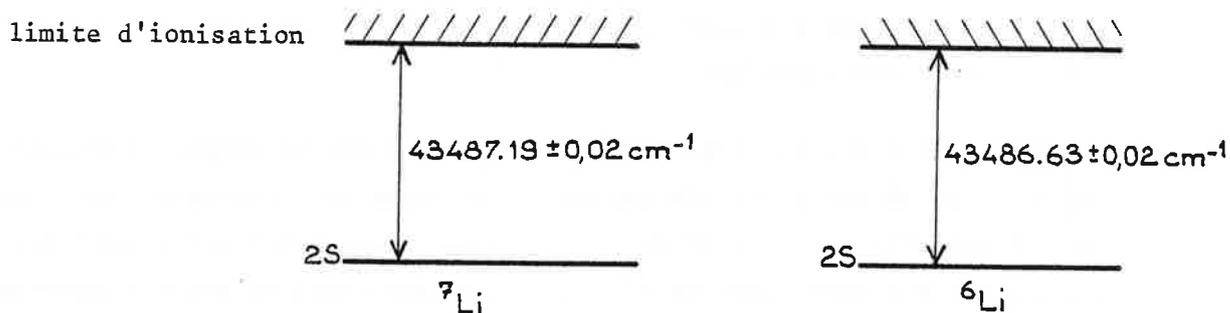
Nous avons choisi d'étudier l'atome de lithium parce que c'est l'atome qui représente le mieux le système hydrogénoïde (influence du coeur faible) sans toutefois posséder les grandes difficultés expérimentales associées à l'atome d'hydrogène.

Il comporte 3 électrons et sa configuration dans l'état fondamental est



A l'état naturel, il se trouve sous la forme d'un mélange de deux isotopes ${}^7_3\text{Li}$ et ${}^6_3\text{Li}$ dans les proportions respectives de 92,5 % et 7,5 %. La limite d'ionisation est de

$$43487.19 \pm 0,02 \text{ cm}^{-1} \quad [\quad]$$



Ses niveaux d'énergie sont donnés à partir de la limite d'ionisation par

$$E = - \frac{\text{Ryd}}{n^{*2}} \quad \text{où Ryd est la valeur de la constante de Rydberg corrigée par le terme de masse}$$

$$n^* = n - \delta_{n,l} \quad \text{où } \delta_{n,l} \text{ est le défaut quantique du niveau } n,$$

$$\text{Ryd} = \frac{R_\infty}{\frac{m_e}{m_e + m_{\text{Li}}}} = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m_e}{m_{\text{Li}}}}$$

$$R_\infty = 109737,318 \text{ cm}^{-1}$$

$$\text{Ryd} = 109728,80 \text{ cm}^{-1} \quad \text{pour le } {}^7\text{Li}$$

Parmi les alcalins, le lithium a les plus faibles défauts quantiques

0,399 pour les états S

0,053 pour les états P

Les autres niveaux d, e, f peuvent être considérés comme parfaitement hydrogénoïdes ($S_{n,l} (\ell \geq 2) = 0$).

D'autre part le Li est également un excellent élément pour étudier les effets dûs au champ électrique motionnel : sa légèreté fait que sa vitesse thermique moyenne est relativement élevée ≈ 1700 m/s.

2. Excitation.

L'excitation à un seul photon à partir de l'état fondamental est possible grâce à un système laser complexe fournissant des impulsions de durée 10 ns de grande puissance, monomodes, de longueur d'onde 230 nm et balayables sur plus de 6000 GHz.

La résolution est de 1 GHz.

La configuration ne nous permet d'exciter qu'en polarisation π ou $\sigma = \sigma^+ + \sigma^-$.

Le schéma d'excitation est donc très simple et est représenté sur la figure III.1.a).

En présence de champ magnétique, le moment cinétique n'est plus un bon nombre quantique, seul M et la parité sont des bons nombres quantiques. Partant de l'état S, de parité totale +1, les états d'arrivée d'après les règles de sélection dipolaires électriques sont des états de parité totale -1.

La parité Π_z étant reliée à la parité totale par

$$\Pi_z = (-1)^{M_{\Pi_t}}$$

en polarisation π les états d'arrivée ont une parité $\Pi_z = -1$

en polarisation σ les états d'arrivée ont une parité $\Pi_z = +1$

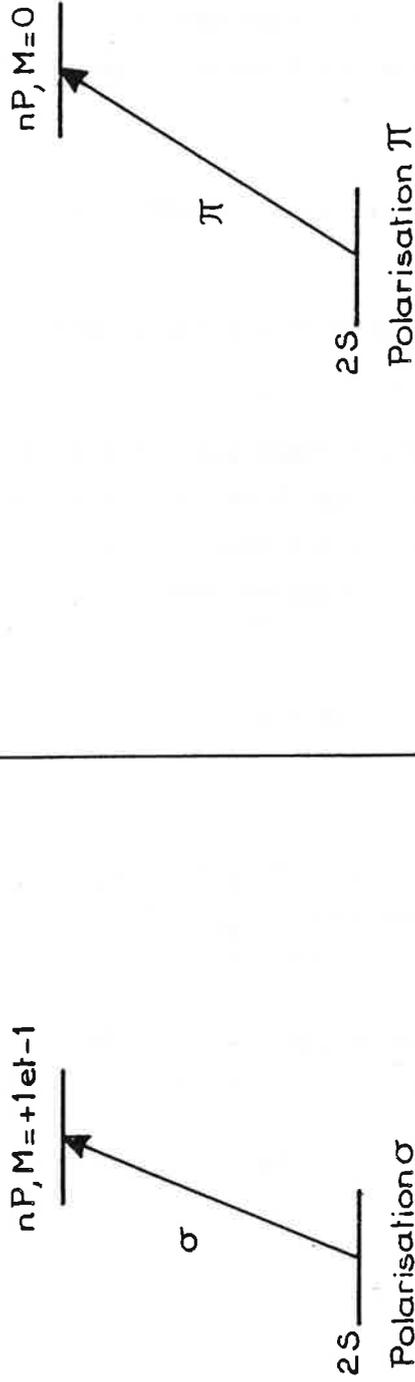
Le schéma d'excitation est représenté sur la figure III.1.b).

Bien que ℓ ne soit plus un bon nombre quantique, les règles de sélection imposent que nous n'excitons que la partie P des états d'arrivée.

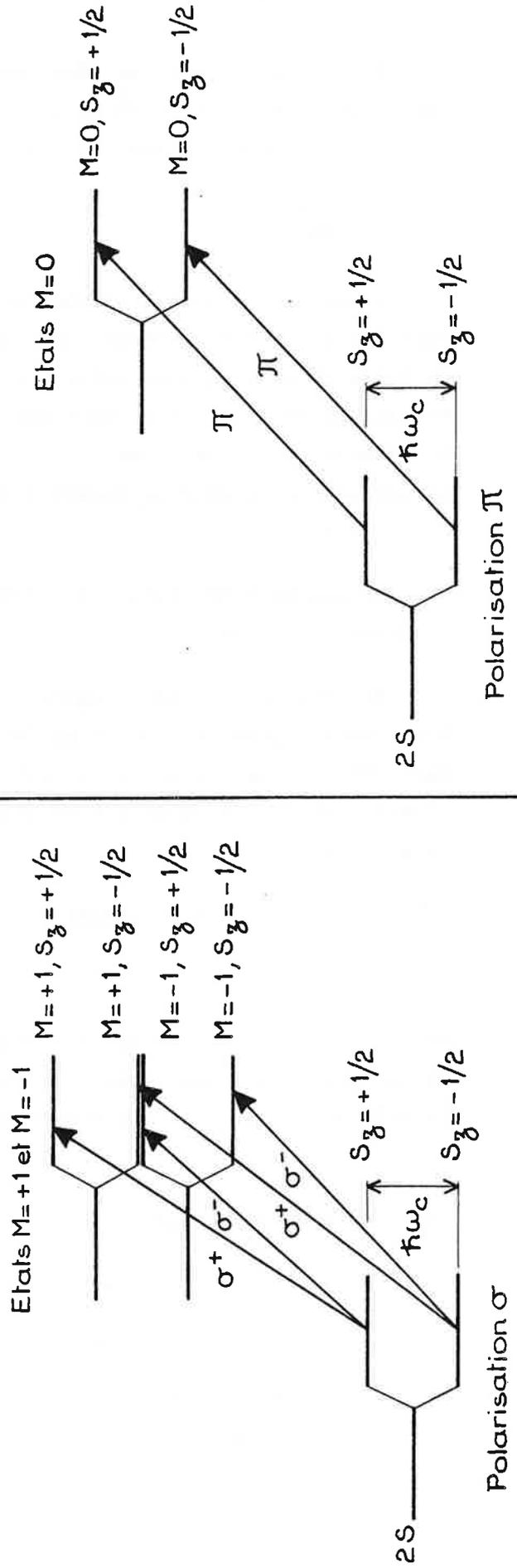
En polarisation σ , les états d'arrivée se décomposent en deux espaces $M = -1$ et $M = +1$ qui n'interagissent pas entre eux. Ils diffèrent simplement du terme paramagnétique $-\frac{\hbar\omega_c}{2}$ pour $M = -1$, $+\frac{\hbar\omega_c}{2}$ pour $M = +1$. Nous aurons donc sur nos spectres la superposition de deux spectres identiques décalés de $\hbar\omega_c$.

Figure III-1

a) SCHEMA D'EXCITATION SANS CHAMP MAGNETIQUE



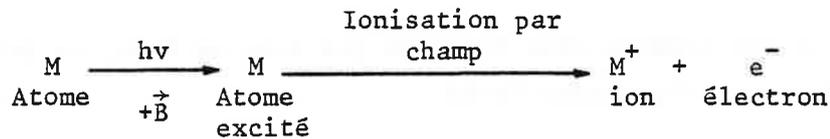
b) SCHEMA D'EXCITATION EN CHAMP MAGNETIQUE



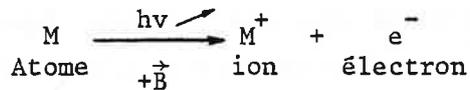
3. Détection.

Travaillant sur un jet atomique, la détection des états se fait par une méthode d'ionisation par champ : on applique une impulsion de champ électrique après l'impulsion laser qui ionise l'état formé. On collecte l'électron par un détecteur à barrière de surface du même type que celui de la référence []. Il est insensible au champ magnétique mais nécessite une accélération préalable des électrons par une haute tension.

Comme le montre le schéma ci-dessus, suivant les états formés, la photoionisation peut être directe ou produite par un champ électrique.



Excitation optique en présence d'un champ magnétique
Détection des états liés par ionisation par champ.



Photoionisation en présence de champ magnétique.

4. Le champ magnétique.

Notre aimant supraconducteur permet d'atteindre des champs magnétiques allant jusqu'à 6,9 T. Il s'agit de deux bobines placées dans la configuration de Helmholtz, permettant une très grande homogénéité du champ. La zone d'interaction placée au centre des bobines est accessible dans trois directions perpendiculaires de l'espace (ce qui n'est pas le cas avec un solénoïde). Ceci permettra l'étude du champ électrique motionnel dans une configuration où champ magnétique et jet atomique sont perpendiculaires, ce qui est impossible avec un solénoïde.

III - Description détaillée du dispositif expérimental.

Le schéma du dispositif est décrit figure III.2.

L'enceinte à vide dans laquelle se place les éléments de notre dispositif se décompose en deux parties pompées séparément :

- . la partie four
- . la partie zone d'interaction et détection.

Suivons le cheminement de l'atome à l'intérieur de cette enceinte :

- . il est produit sous forme de jet dans un four, ce jet est précollimaté par un diaphragme froid.

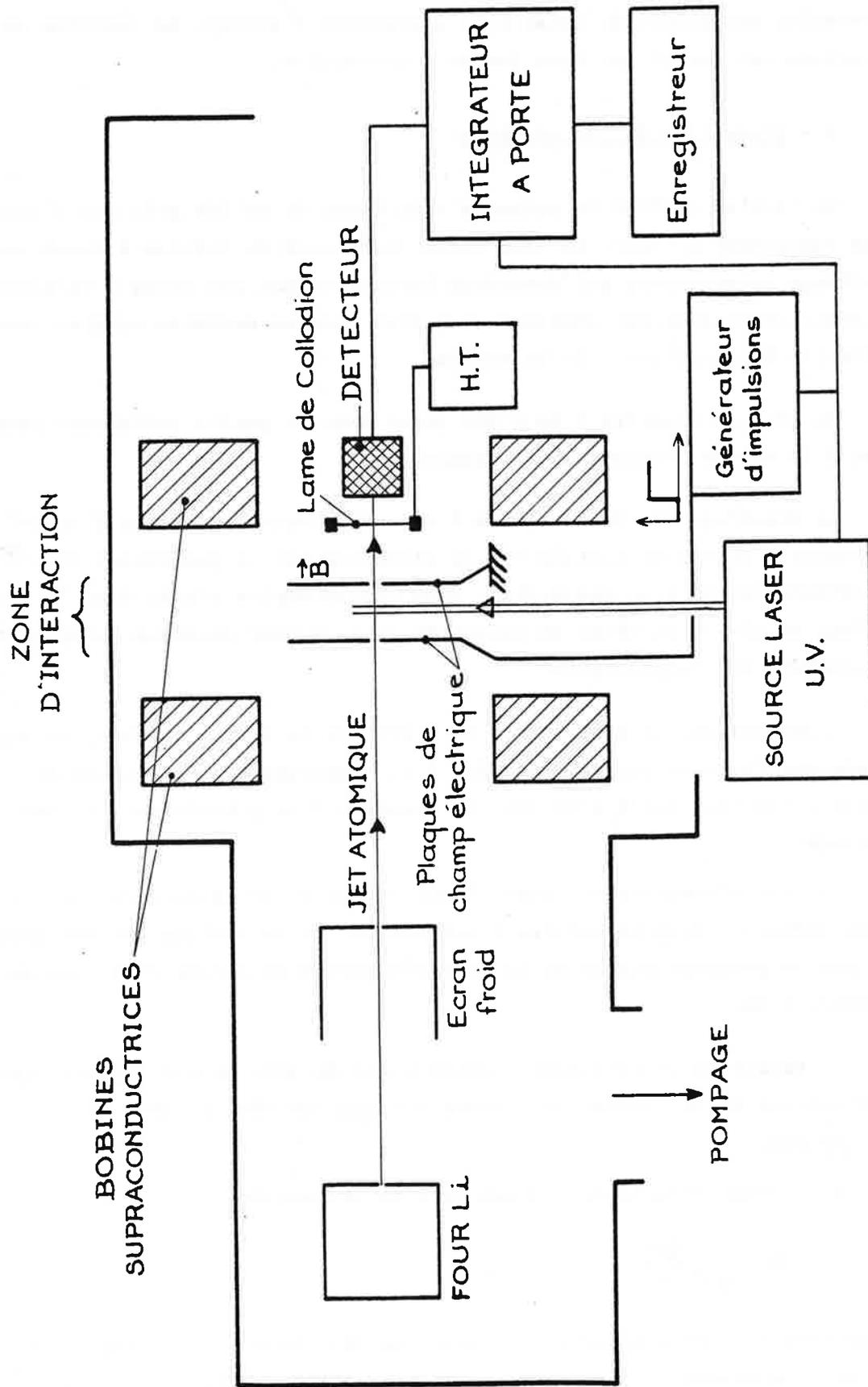
- . il traverse ensuite deux plaques percées de trous qui délimitent la zone d'interaction. Entre ces deux plaques, où règne un champ magnétique intense, l'atome est excité par la radiation UV d'un système laser. Pour ioniser les états formés, on applique après l'impulsion laser, une impulsion de champ électrique entre les deux plaques. L'électron formé suit les lignes de champ magnétique et entre dans une région où règne une haute tension qui l'accélère vers le détecteur. L'impulsion électrique qui en résulte est traitée par le système d'acquisition de données.

Après cette brève description, nous allons nous intéresser en détail à chaque partie du montage, en insistant sur ses particularités et sur les difficultés expérimentales que nous avons rencontrées.

1. Le jet atomique.

A - Le pompage.

L'ensemble four-zone d'interaction-détecteur est maintenu dans un vide d'environ 2.10^{-7} torr par deux groupes de pompages distincts communiquant par une vanne. Cette disposition facilite les interventions sur les différents éléments du montage (remplissage du four, contrôle de la zone d'interaction). La zone d'interaction placée à l'intérieur du cryostat, est très froide, et piège par condensation la vapeur d'eau difficile à pomper. C'est pourquoi, l'obtention d'un bon vide très important dans



.SCHEMA DU DISPOSITIF.

Figure III-2

cette zone, nécessite des précautions particulières lors des interventions à pression atmosphérique (mise sous atmosphère d'azote). Le contrôle des pressions est assuré par deux jauges à ionisation.

B - Production du jet atomique.

Le lithium utilisé se présente sous forme de solide gris qui s'oxyde très rapidement à l'air. La très forte réactivité du lithium à chaud avec l'alliage acier-cuivre qui constitue habituellement nos fours a nécessité la réalisation dans nos ateliers d'un four dans un matériau spécial assez difficile à travailler : le molybdène.

Un trou de diamètre 1 mm a été percé dans la partie supérieure permettant à la vapeur atomique de s'échapper.

Le chauffage est obtenu grâce à une résistance constituée d'un enroulement d'un fil de tantale (14 Ω) alimentée par un générateur régulé en courant couplé à un thermostat. Deux thermocouples placés dans la masse du four au niveau du métal en fusion et de la vapeur atomique permettent le contrôle des températures.

A une dizaine de centimètres de l'orifice de sortie du four, un diaphragme froid en cuivre, refroidi à la température d'ébullition de l'azote, liquide, percé d'un trou de diamètre 1 mm précollimate le jet d'atomes.

La zone d'interaction étant située à plus de 40 cm du four, le jet a une dimension trop importante à cet endroit et la collimation est assurée par la première plaque de la zone d'interaction percée d'un trou de diamètre 2 mm.

La valeur de la collimation obtenue est de 300, ce qui signifie que la direction de la vitesse de l'atome est dans un cône de demi angle $\alpha = \frac{1}{300}$ rad.

La vitesse moyenne des atomes dans le jet est de

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = 1700 \text{ m/s}$$

Sa densité peut être mesurée en plaçant un fil chaud sur la trajectoire du jet, les atomes sont alors ionisés et on collecte les ions sur une

plaque portée à un potentiel négatif. Le courant d'ions résultant est mesuré par un picoampèremètre. Il est de l'ordre de $I = 10^{-9}$ A, ce qui correspond en tenant compte de la géométrie du jet à une densité de

$$n = \frac{I}{vSq} = 10^7 \text{ atomes/cm}^3 \quad \begin{array}{l} S : \text{section du jet} \\ v : \text{vitesse de l'atome} \end{array}$$

C - Zone d'interaction.

C'est la zone où le jet atomique subit l'interaction avec la lumière excitatrice et où règne le champ magnétique (figure III.3). Elle doit être accessible au jet, à la radiation UV et au système de détection des électrons. L'aimant supraconducteur constitué de deux bobines de Helmholtz a été conçu pour que cette zone soit accessible dans les trois directions orthogonales de l'espace.

Dans les expériences que nous avons réalisées, le champ magnétique est parallèle au jet atomique (direction zz' sur la figure III.3). Cette configuration est nécessaire si l'on désire éviter l'apparition du champ électrique motionnel. Le laser parvient jusqu'à la zone d'interaction selon l'axe $x'x$, en traversant une fenêtre en fluorine transparente à la longueur d'onde 230 nm. Il excite perpendiculairement les atomes du jet atomique supprimant ainsi l'élargissement des raies dû à l'effet Doppler.

L'axe YY' est utilisé pour placer des accessoires : une jauge à ionisation permettant la mesure de la pression, le fil chaud escamotable permettant la mesure de l'intensité du jet atomique.

Un schéma plus précis de la zone d'interaction est représenté sur la figure III.4.

Elle est limitée par 3 plaques :

- . la première en amont percée d'un trou de diamètre 2 mm
- . les deux autres percées d'un trou de diamètre 3 mm forment une zone tampon à la masse, afin d'éviter des champs électriques parasites qui pourraient créer la haute tension appliquée au détecteur.

La plaque amont est isolée électriquement et permet l'application d'une

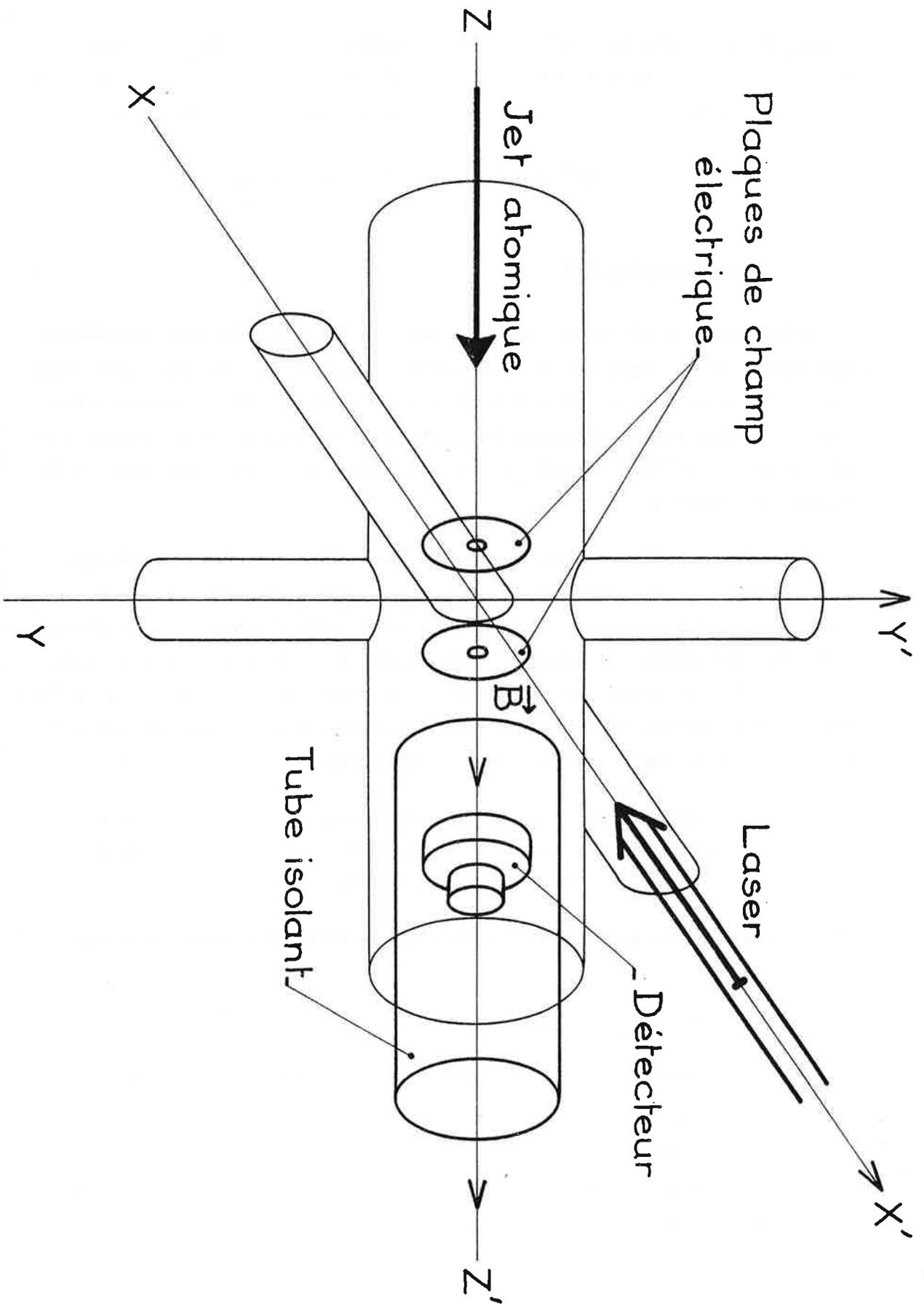


Figure III-3 : GEOMETRIE DE LA ZONE D'INTERACTION.

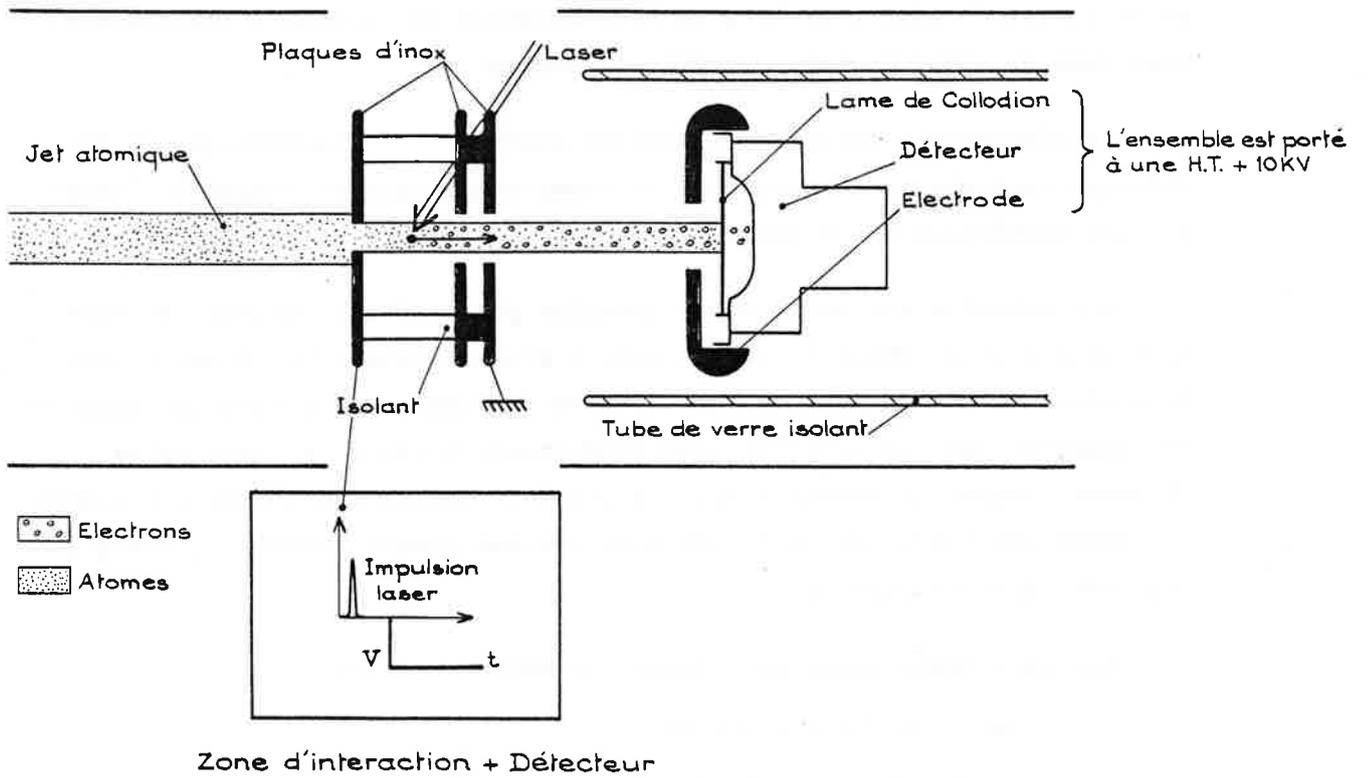


Figure III-4 : ZONE D'INTERACTION.

impulsion de tension négative après l'impulsion laser (ionisation par champ électrique).

2. Le détecteur et le traitement du signal.

A - Le détecteur.

Les électrons libérés par l'impulsion de champ électrique, suivent les lignes de champ magnétique, qui dans la disposition de Helmholtz divergent lorsqu'on s'éloigne de l'axe des bobines. Il est donc nécessaire de placer le détecteur le plus près possible de la zone d'interaction, donc dans un environnement magnétique intense.

Le détecteur à barrière de surface emprunté à la technologie de la physique nucléaire est insensible au champ magnétique et réagit à l'énergie des particules ou du rayonnement qu'il reçoit.

Son principe est celui d'une jonction polarisée en inverse. Un barreau de silicium, dopée n, est recouvert d'une couche d'or. A cette jonction ainsi formée on applique une tension inverse, ce qui crée une zone de déplétion dans le matériau semi-conducteur. Lorsque les particules viennent frapper la couche d'or, des porteurs apparaissent dans cette zone et créent aux bornes de la jonction un courant proportionnel à l'énergie des particules incidentes.

Les caractéristiques principales du détecteur sont :

- . sa zone utile : 100 mm^2
- . la tension de polarisation inverse 50 V environ
- . son bruit 17 keV à la tension choisie de 50 V
- . son temps de réponse.

Pour avoir des particules suffisamment énergétiques, il est nécessaire d'accélérer les électrons créés dans la zone d'interaction. Après quelques essais, nous avons choisi de porter le détecteur à une haute tension (10 KV). Un électron accéléré a donc une énergie de 10 KeV. Le rapport signal/bruit est très bon puisque le bruit du détecteur correspond à l'arrivée de deux électrons et que nous en détectons plusieurs dizaines de milliers. Le circuit électrique de la partie détecteur est décrit figure III.5.

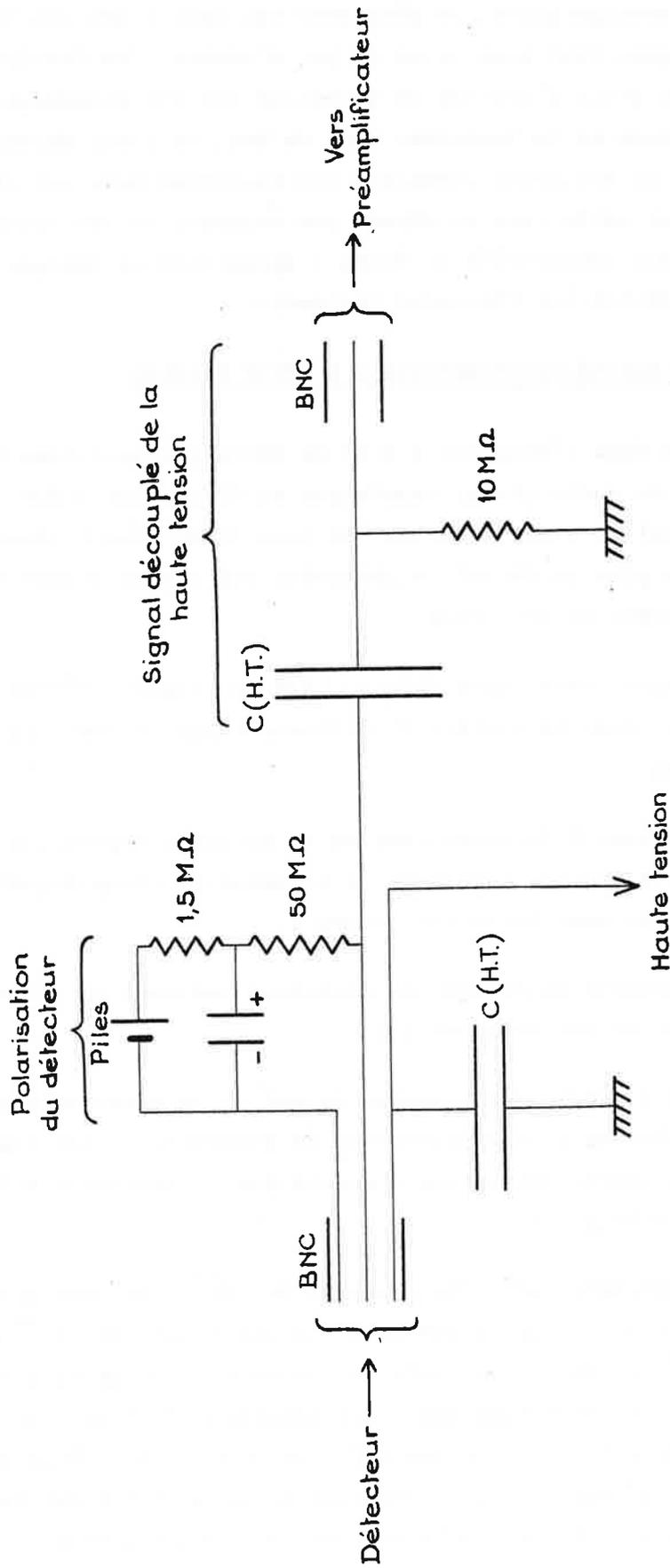


Figure III-5 : - SCHEMA DE POLARISATION DU DETECTEUR -

Dans notre configuration, le détecteur est dans l'axe des lignes de champ magnétique, donc dans celui du jet d'atomes. Ces derniers doivent être stoppés avant d'arriver au détecteur car ils endommageraient l'électrode frontale et la jonction. Dans ce but, on place devant celui-ci une fine lame de collodion perméable aux électrons mais qui arrête les atomes du jet. Sur cette lame on dépose par évaporation une couche d'or, qui rend la surface conductrice et évite l'apparition de charges parasites susceptibles de dévier les électrons incidents.

B - Une difficulté expérimentale : l'effet Penning

La formation dans l'enceinte à vide de décharges associées à la présence simultanée de forts champs magnétique et électrique a été la source majeure de difficultés expérimentales que nous avons eues à résoudre. Aussi nous décrirons plus en détail ce phénomène qui a conditionné le schéma électrique du système de détection.

Dans un premier temps, nous avons placé les plaques d'interaction à la haute tension, alors la lumière UV diffusée frappant les plaques amorçait des décharges.

Avec le détecteur à la haute tension et en champ magnétique nul, nous n'en observions plus aucune. Cependant en présence du champ magnétique, elles réapparaissaient sous forme lumineuse.

Afin d'interpréter ce phénomène, rappelons quelques mécanismes simples des décharges disruptives dans les gaz.

Dans un tube où règne une pression de gaz p , on applique entre deux électrodes distantes de d , une différence de potentiel V . Une étude expérimentale de la décharge disruptive a montré que la tension d'allumage ne dépend que du produit $p \times d$.

Dans notre enceinte, avec une pression de 10^{-7} torr, des distances de l'ordre du centimètre, la valeur de $p \times d$ est d'environ 10^{-10} Atm cm. Le libre parcours des électrons varie en raison inverse de la pression, la multiplication des électrons par chocs ionisants diminue avec la pression, il en est de même des ions positifs, or pour qu'une décharge s'entretienne, il est nécessaire qu'un électron germe accéléré par le champ électrique soit remplacé par un électron secondaire arraché à la cathode

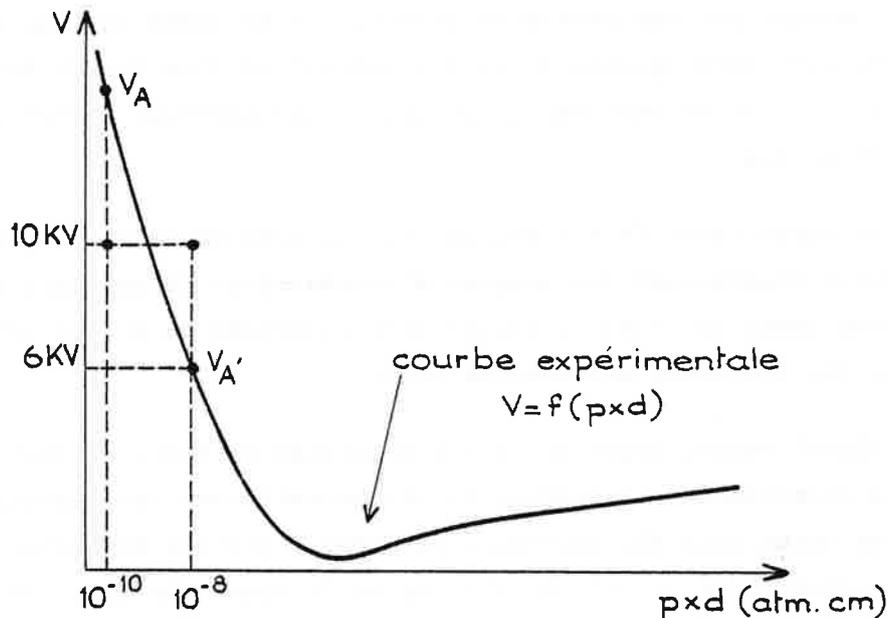
par l'arrivée des ions positifs. Il faut un nombre minimum d'ions positifs pour produire l'émission d'un électron secondaire, ce nombre doit être produit par les chocs de l'électron germe dans son trajet cathode-anode.

Les électrons secondaires accélérés à leur tour, pourront ioniser d'autres atomes, ce processus d'avalanche entretenant la décharge dans le gaz.

Sous l'action du champ magnétique, les électrons ont une trajectoire hélicoïdale avec des petits accidents dûs aux chocs avec les atomes du gaz. Entre deux points, ce trajet a une longueur beaucoup plus importante que s'il avait lieu en ligne droite. La distance réelle de parcours n'est plus d , mais 10 ou $100 d$, la tension d'allumage est celle correspondant au produit $10 pd$ ou $100 pd$, donc plus faible qu'en l'absence de champ, ce qui facilite la décharge disruptive.

Cet effet porte le nom d'effet Penning.

La figure résume la situation : la tension de 10 kV que nous appliquons est inférieure en champ magnétique nul à la tension d'allumage V_a ($p \times d$). En présence de champ magnétique, l'augmentation artificielle du produit pd , rend les 10 kV supérieurs à V'_a ($100 \times p \times d$).



Effet Penning : décharge en présence de champ magnétique

Pour résoudre cette difficulté expérimentale nous avons placé un tube isolant de verre autour du détecteur. Cet isolant porte des charges qui ne doivent pas perturber ni la zone d'interaction, ni la détection. Pour cette raison, le tube (comme représenté sur la figure III.4) ne s'étend pas jusqu'à la zone d'interaction.

Outre la dépendance en fonction du produit $p \times d$ l'allumage d'une décharge dépend de la rugosité (pouvoir des pointes) et de la propreté (électron germe) des surfaces. Nous avons donc arrondi et poli toutes les surfaces des électrodes dans la zone considérée.

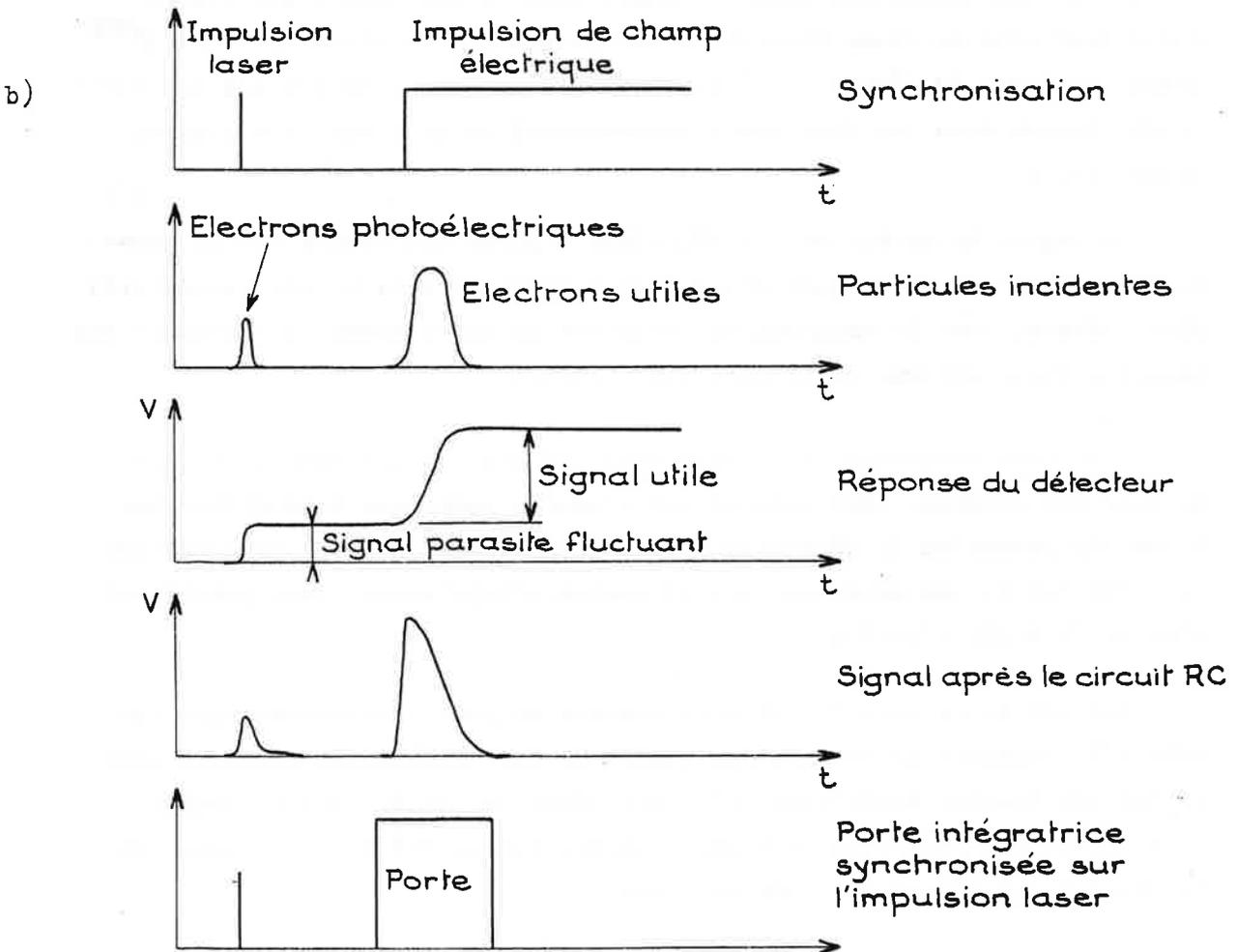
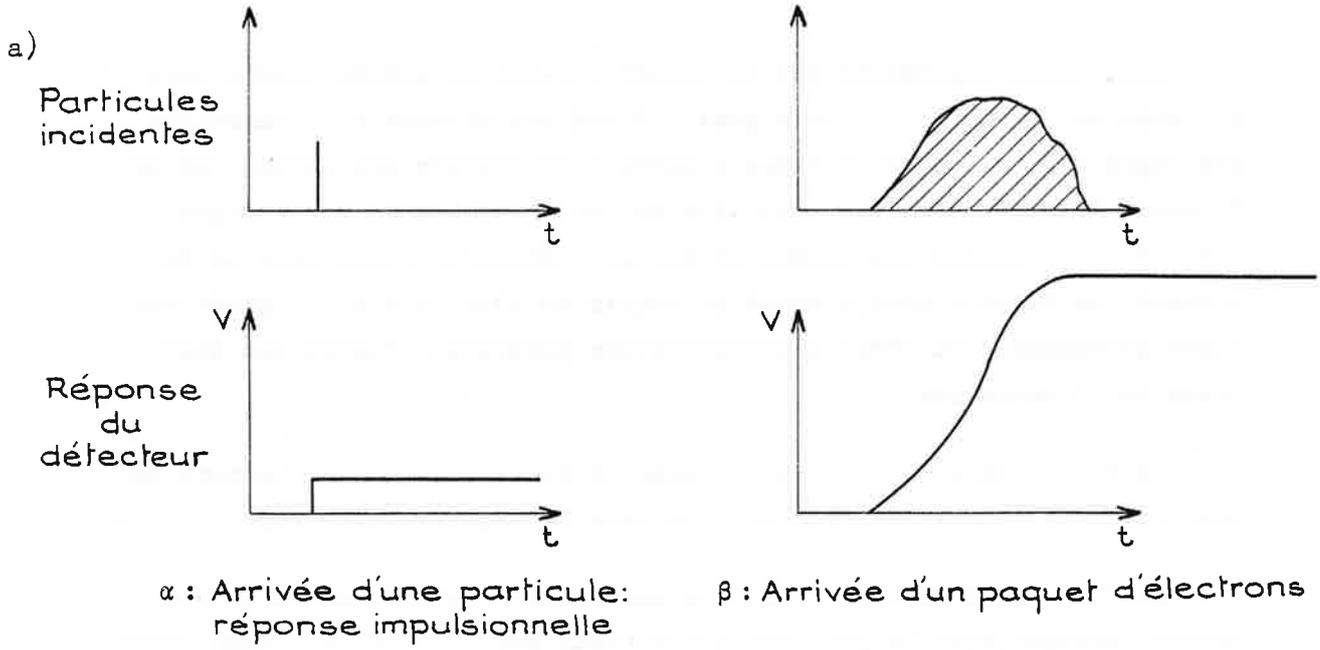
C - Le traitement du signal

La réponse impulsionnelle du détecteur est représentée figure III.6.a α , elle correspond à une seule particule incidente d'énergie E. Lorsqu'un paquet d'électrons arrive sur le détecteur, celui-ci intègre les signaux correspondant à chaque électron et le signal résultant est (à énergie d'un électron fixé : tension accélératrice fixée) proportionnel à leur nombre (fig. III.6.a β).

Le signal est amplifié par un préamplificateur de haute impédance et de faible gain et visualisé sur un oscilloscope cathodique. La synchronisation est assurée par une partie du faisceau IR du laser Nd Yag, que l'on transporte par fibre optique jusqu'à l'endroit où l'on traite le signal, ceci afin d'éviter au maximum les parasites que pourrait capter un câble coaxial très long.

Le faisceau laser UV diffusé par le jet crée un effet photoélectrique sur le métal constituant les plaques d'interaction. Il apparaît pendant l'impulsion laser un signal parasite très fluctuant dû à l'arrivée sur le détecteur des électrons arrachés au métal.

Le signal obtenu ayant une forte constante de temps de décroissance n'est pas directement utilisable, il intègrerait tous les signaux parasites et notamment ceux qui apparaissent avant l'arrivée du signal recherché. Il est nécessaire de le différencier et de la convertir ainsi en une impulsion qui peut ensuite être traitée par un système électronique de détection à porte.



. ACQUISITION DU SIGNAL : RESOLUTION DANS LE TEMPS .

Figure III-6

Nous avons représenté sur la figure III.6.b un schéma résolu dans le temps de l'acquisition du signal d'électrons obtenus par ionisation par champ électrique. A un temps τ après l'excitation des atomes par le faisceau laser, on applique aux plaques une impulsion de champ électrique, celle-ci ionise les atomes et dirige l'électron formé vers le détecteur. On observe généralement en sortie du détecteur deux impulsions, l'une provenant d'un effet photoélectrique parasite, l'autre des électrons de l'ionisation.

La détection sélective est obtenue en faisant coïncider temporellement la porte du système électronique avec le signal utile (fig. III.7.a).

En fait les atomes excités dans des états de grande durée de vie peuvent voyager dans le jet atomique et atteindre la zone de champ électrique du détecteur sans être perturbés, ils sont alors ionisés après avoir subi une dispersion dans le temps. Dans ce cas nous n'appliquons pas d'impulsion de champ électrique aux plaques et le signal est élargi comme le montre la figure III.7.b. L'expérience nous a montré que les signaux obtenus dans ces conditions présentaient un bien meilleur rapport signal/bruit.

Le signal de sortie de l'intégrateur à porte est envoyé sur un enregistreur à plumes. Le signal d'absorption d'une cellule à iode, enregistré simultanément avec le balayage en fréquence du laser permet d'étalonner nos spectres (voir système laser paragraphe III.4).

Nous nous orientons maintenant vers une acquisition numérique informatisée des données. Pour cela un oscilloscope numérique échantillonnant à 100 MHz permettra la détection sélective du signal dans de bien meilleures conditions, son moyennage sur un nombre d'impulsions laser prédéterminées et sa digitalisation.

Sur une autre voie de cet oscilloscope on peut enregistrer simultanément l'intensité du rayonnement laser. Un mini ordinateur stockera alors toutes ces données numériques. Il pourra dans un proche avenir stocker aussi le signal référence (spectre d'absorption de l'iode) et piloter le balayage de la longueur d'onde du laser.

Outre l'acquisition et le stockage, un tel dispositif permettra de simplifier considérablement le traitement des données (normalisation du signal, dépouillement des spectres,...).

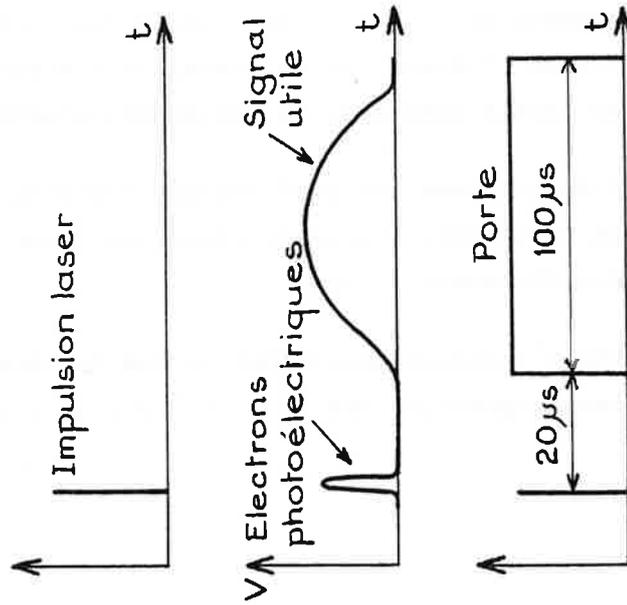
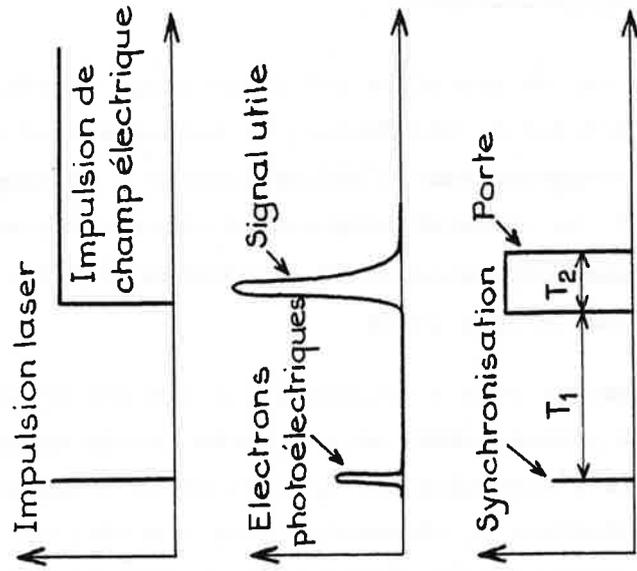


Figure III-7 : Acquisition du signal.

3. L'aimant supraconducteur.

A - Description générale.

Ce modèle est un prototype qui a été conçu et réalisé pour notre expérience au S.T.I.P.E. CEA Saclay. Il est constitué de deux bobines de Helmholtz, plongeant dans l'hélium liquide à sa température d'ébullition de 4,2 K. Le cryostat comprend un réservoir placé au-dessus des bobines, il a une contenance de 60 l d'hélium liquide, ce qui permet une autonomie de plus de deux jours.

La consommation peut s'évaluer à 1,6 l/heure d'hélium liquide, soit 1,2 m³ d'hélium gazeux libéré en une heure. Cette consommation dépend essentiellement de l'isolation des bobines et du cryostat. Les pertes de chaleur par conduction et convection sont limitées par une double paroi dans laquelle règne un vide cryogénique. L'utilisation de matériaux isolants spéciaux, métallisés sur leur face interne évite le rayonnement de la chaleur.

Les câbles amenant le courant aux bobines, les fils transportant les informations de température, de niveau d'hélium, de mesure de champ magnétique, mettent en communication l'intérieur et l'extérieur du cryostat et nécessitent une isolation soignée. Un circuit que nous appellerons "amenées de courant" a été conçu pour l'isolation thermique de ces câbles. Les parois dans les trois directions menant à la zone d'interaction sont isolées thermiquement du cryostat. Des essais ont montré qu'à pression atmosphérique, lorsque l'aimant est en froid, on n'observe pas de formation de givre sur les parois internes, ce qui montre l'efficacité de l'isolation.

L'ensemble du cryostat est posé sur une couronne permettant la rotation de l'aimant et la possibilité de placer le champ magnétique parallèlement ou perpendiculairement au jet.

Dans la zone d'interaction, au centre des bobines de Helmholtz, l'homogénéité du champ magnétique est $\frac{\Delta B}{B} \leq 10^{-4}$ sur un volume d'un cm³.

B - Le matériau supraconducteur

La résistivité de certains métaux à température très basse tombe à une valeur infiniment petite, c'est le phénomène de supraconductivité.

Ces matériaux permettent la construction d'enroulements dans lesquels peut circuler un courant intense sans perte par effet Joule. Pour la construction d'aimant, il faut tenir compte d'un facteur supplémentaire : l'état supraconducteur ne résiste pas toujours au champ magnétique créé par les courants circulant dans les enroulements ; s'il existe un seuil en température au phénomène de supraconductivité il existe aussi un seuil en champ magnétique.

Certains métaux (niobium, titane, tantale) et certains alliages de ces métaux ont permis d'obtenir des seuils non prohibitifs pour la construction d'aimants.

Le matériau qui compose nos bobines est un composite de niobium-titane et de cuivre sous forme de fils que l'on enroule. On les imprègne ensuite d'une résine spéciale que l'on polymérise à 100°C.

Dans chacune des bobines, une sonde à effet Hall a été placée pour contrôler le champ magnétique sur le conducteur.

Les performances de l'aimant sont : un champ central de 6T, un courant maximal de 153,12 A correspondant à une densité de 14170 A/cm^2 . Le champ magnétique maximal sur le conducteur est de 7,37 T, l'inductance de la bobine est de 16,7 Henry. L'énergie magnétique emmagasinée est alors de 196 kJ.

A la température d'ébullition de l'hélium 4,2 K, le champ magnétique critique pour lequel se produit la transition est de 8,27 T correspondant à un courant de 172 A.

Le matériau supraconducteur sert aussi à la construction de l'interrupteur supraconducteur. Celui-ci est sans self d'induction et permet d'emprisonner le courant qui circule alors indéfiniment dans les bobines sans dépense d'énergie. Cette remarque nous amène à décrire le schéma électrique associé à l'aimant supraconducteur.

C. Circuit électrique.

La figure III.8 représente le câblage interne et externe de l'aimant supraconducteur.

α - Câblage interne.

Ce câblage est entièrement inséré dans le circuit "amenée de courant". L'interrupteur supraconducteur est placé au-dessus des bobines dans un compartiment isolé. Une vanne permet en position ouverte de laisser pénétrer dans le compartiment l'hélium liquide qui refroidit l'interrupteur jusqu'à la supraconduction. A l'inverse, en position fermée, on isole l'interrupteur et on le réchauffe à l'aide d'une chaufferette constituée d'une résistance de manganine (11Ω) aux bornes de laquelle on applique des impulsions de tension très courtes ($15 \text{ V} \times 0,1 \text{ s}$). L'hélium se vaporise et l'on atteint la température de 10 K, suffisante pour faire transiter l'interrupteur vers un état résistif.

La variation d'une résistance A_1 située entre la dernière couche supraconductrice et la chaufferette permet le contrôle de la température de l'interrupteur.

β - Câblage externe

Les bobines supraconductrices sont alimentées par un générateur de courant stabilisé ATNE délivrant des courants d'intensité 0 à 180 A sous une tension de 4-5 volts.

Le temps de montée du courant est déterminée par l'inductance des bobines (16,7 Henry) et par les résistances résiduelles des câbles.

L'alimentation est conçue pour choisir

- . I le courant palier
- . V la tension maximale de charge
- . $\frac{dI}{dt}$ temps de montée du courant.

Ce dispositif nous permet de réaliser des enregistrements à champ magnétique fixe (I fixe), ou de balayer lentement le champ magnétique (commande $\frac{dI}{dt}$).

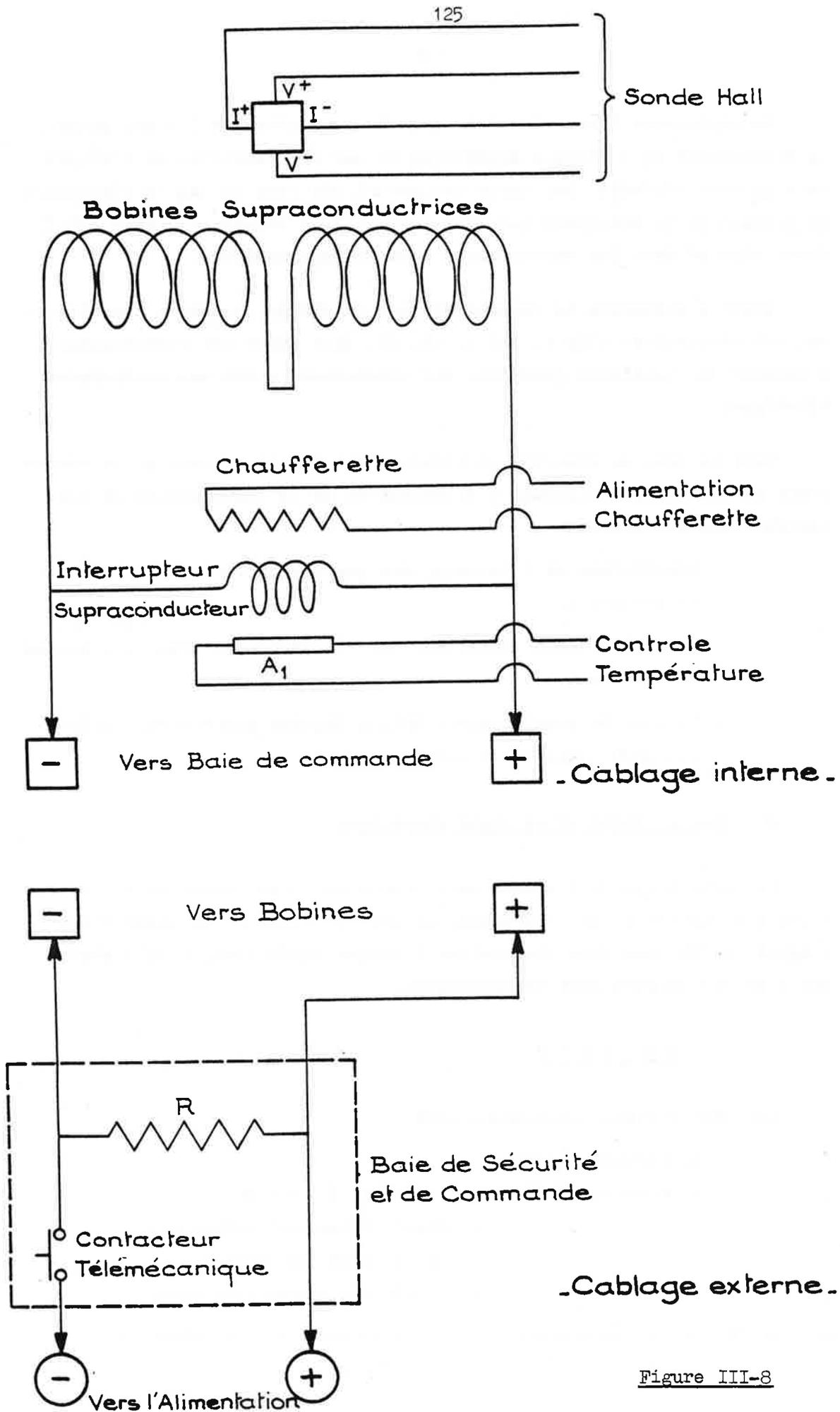


Figure III-8

La résistance R est une résistance de protection de 1Ω qui permet la dissipation de l'énergie magnétique en cas de transition de l'aimant vers un état résistif. Des tests ont prouvé que dans ce cas la résistance de protection ne dissipait que 10 % de l'énergie totale, le reste (90 %) étant dissipé dans les enroulements sans dommage apparent.

Avant d'atteindre le courant nominal de 165 A, plusieurs transitions ont été nécessaires (130 A, 142 A, 152 A), leur effet est probablement d'obtenir une meilleure géométrie des conducteurs grâce aux contraintes mécaniques.

Dans la baie de sécurité se trouve, entre le contacteur et la résistance de sécurité, le circuit d'alimentation de la chaufferette et les informations suivantes :

- . température de l'interrupteur supraconducteur grâce à la résistance A_1
- . mesure du champ magnétique sur le conducteur grâce aux sondes à effet Hall
- . le taux de remplissage d'hélium liquide grâce à une jauge plongeant dans le cryostat.

D - Mise en froid et en champ magnétique

La technologie de l'aimant supraconducteur étant nouvelle au Laboratoire Aimé Cotton et les opérations de mise en froid et en champ étant longues, difficiles mais nécessaires à chaque expérience, il m'a semblé utile de les décrire dans ce paragraphe.

α - Mise en froid

Les deux circuits principaux sont

- . le circuit d'azote
- . le circuit d'hélium qui comporte 3 parties :
 - le circuit principal (cryostat)
 - le compartiment interrupteur
 - le circuit des amenées de courant.

Le contrôle de la température s'effectue en mesurant la valeur de la

résistance des bobines soit

300 Ω à température ambiante 295 K

28 Ω à température d'ébullition de l'azote 77 K

0 Ω à partir de 6 K jusqu'à la température d'ébullition de l'hélium 4,2 K.

L'hélium liquide étant d'un coût assez élevé, on commence le refroidissement par un transfert d'azote jusqu'à la température de 77 K, puis après avoir pompé le circuit d'azote, on peut commencer le transfert d'hélium de notre conteneur de 250 l vers le cryostat par l'intermédiaire d'un siphon à double paroi pompé sous vide. Le transfert s'effectue sous une pression extérieure de 120 mbar, la pression interne du cryostat étant de 80 mbar environ. Pour des raisons économiques, l'hélium qui se vaporise est récupéré sous forme gazeuse par un circuit spécialement conçu, dirigé vers un compresseur, puis acheminé vers le centre de liquéfaction de l'IPN (Faculté d'Orsay). Nous récupérons ainsi la quasi totalité de l'hélium liquide sous forme gazeuse.

A la température de 6 K, les bobines deviennent supraconductrices et la mise en champ est désormais possible. A 4,2 K on commence à remplir le cryostat d'hélium liquide. Le transfert terminé, on enlève le siphon et on règle la vanne des amenées de courant. Ce réglage est totalement empirique, il a été obtenu après de nombreux essais préliminaires. L'équilibre de pression entre le cryostat et l'extérieur donne une consommation optimale de 1,6 l/h d'hélium liquide.

β - Mise en champ magnétique

Pour établir le courant dans les bobines, on ferme le circuit d'alimentation grâce au contacteur télémechanique. En s'assurant que l'interrupteur n'est pas dans l'état supraconducteur, on fixe le "palier" de courant en fonction du champ magnétique désiré (pour les enregistrements en champ magnétique variable, on peut adapter $\frac{dI}{dt}$ à la vitesse de balayage désirée).

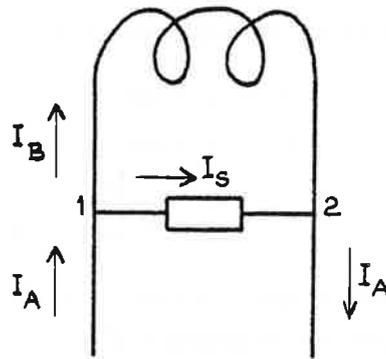
Lorsque le courant palier est atteint, on a :

Bobines supraconductrices $R = 0$, L
 Interrupteur supraconducteur résistif
 Courant palier atteint

$$I_A = I_B + I_S$$

$$V_{12} = R_B I_B = 0$$

$$V_{12} = R_S I_S = 0 \Rightarrow I_S = 0$$



On refroidit l'interrupteur qui devient supraconducteur $R_S = 0$,
 puis on remet le palier à zéro et le courant d'alimentation I_A décroît
 jusqu'à 0 mais l'interrupteur n'ayant ni self ni résistance

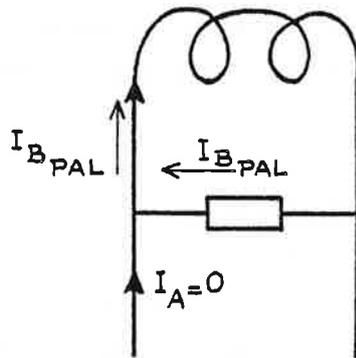
$$V_{12} = 0 \times I_S + 0 \times \frac{dI_S}{dt} = 0$$

Alors
$$V_{12} = 0 = L \frac{dI_B}{dt} \Rightarrow \frac{dI_B}{dt} = 0 \Rightarrow I_B = I_{B_{PAL}}$$

$$\frac{dI_A}{dt} = \frac{dI_B}{dt} + \frac{dI_S}{dt} \Rightarrow \frac{dI_A}{dt} = \frac{dI_S}{dt}$$

le courant I_S décroît de 0 à la valeur où $I_A = 0 = I_{B_{PAL}} + I_S$ soit $I_S = -I_{B_{PAL}}$

On a alors :



Le courant est alors piégé et l'alimentation ne débite plus, on peut
 alors couper celle-ci et l'aimant est totalement autonome.

Pour dépiéger le courant, on reprend la valeur du courant piégé en
 réaffichant le palier précédent. On réchauffe l'interrupteur grâce à la
 chaufferette.

A partir de ce moment, on peut procéder à un nouveau réglage du cou-
 rant en affichant une autre valeur ou bien le redescendre à zéro.

E - Conclusion

Les avantages d'un tel aimant pour notre expérience sont :

- . la valeur du champ magnétique atteinte
- . les trois directions d'accès à la zone d'interaction
- . la grande homogénéité du champ dans cette zone
- . la possibilité de faire pivoter l'aimant.

Mais la mise en froid est une opération très longue nécessitant une journée entière et l'ensemble de l'expérience doit être alors opérationnel. Ces contraintes sont le pendant des avantages de ce type d'aimant.

4. Le système laser

La source de rayonnement ultraviolet utilisée a été réalisée à partir d'un système laser pulsé, monomode, et variable en longueur d'onde, expérimenté depuis quelques années au Laboratoire [98]. Ce système de propriétés assez exceptionnelles (qualité et finesse spectrale du faisceau, puissance délivrée) sera décrit dans le premier paragraphe.

Cet ensemble fonctionnant dans le domaine visible (laser à colorant), il a été nécessaire de l'adapter et de convertir la longueur d'onde en longueur d'onde UV par des opérations d'optique non linéaire. Ces opérations ne modifiant pas les propriétés optiques du faisceau, il est donc théoriquement possible de réaliser une source UV pulsée, monomode et balayable dans le domaine spectral qui nous intéresse.

Pour ce faire, des cristaux non linéaires peu communs existent et nous donnerons un schéma possible d'une telle réalisation à la fin de ce chapitre.

Cependant dans une première étude nous avons préféré une solution qui modifiait le moins possible le système laser en place. Celui-ci, bien que de largeur spectrale plus importante, s'est trouvé et se trouve encore largement suffisant dans la plupart des expériences que nous avons envisagées. C'est cette solution que nous décrirons principalement.

A - Principe du système.

α - Injection.

Le principe est celui du blocage en fréquence de l'émission d'un laser de puissance, pulsé, par injection dans la cavité d'un rayonnement de très faible largeur spectrale.

Les figures III.9 et III.10 montrent la construction des oscillations en mode libre et injecté (a, b, c se référant à ces figures).

Sans injection, les gains étant très élevés, les oscillations du laser pulsé prennent naissance sur le bruit de fluorescence et l'émission laser a lieu sur plusieurs modes (a).

Avec injection d'une radiation de longueur d'onde λ_i , les oscillations du laser pulsé prennent naissance au mode λ_i sur le niveau de la radiation injectée et sur le bruit pour les autres modes.

Pendant une première phase, le milieu est saturé par l'émission à la longueur d'onde λ_i (b). Puis la courbe de gain étant maximale pour la longueur d'onde λ_L d'oscillation libre de la cavité du laser pulsé, c'est elle qui finit par saturer le milieu (c).

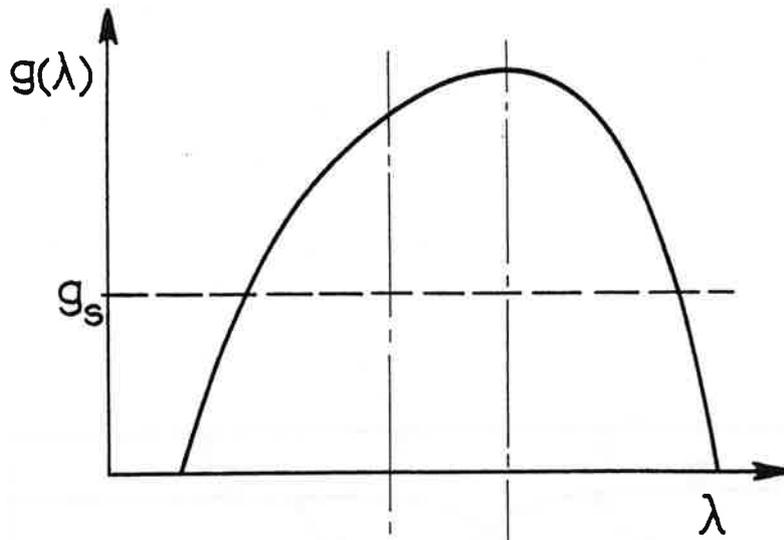
Ce fonctionnement nécessite un colorant dont le gain est à élargissement homogène, une longueur de l'impulsion inférieure à la longueur de la première phase, et pour cela une différence $\Delta\lambda = \lambda_L - \lambda_i$ faible.

β - Une seule cavité à double excitation séparée.

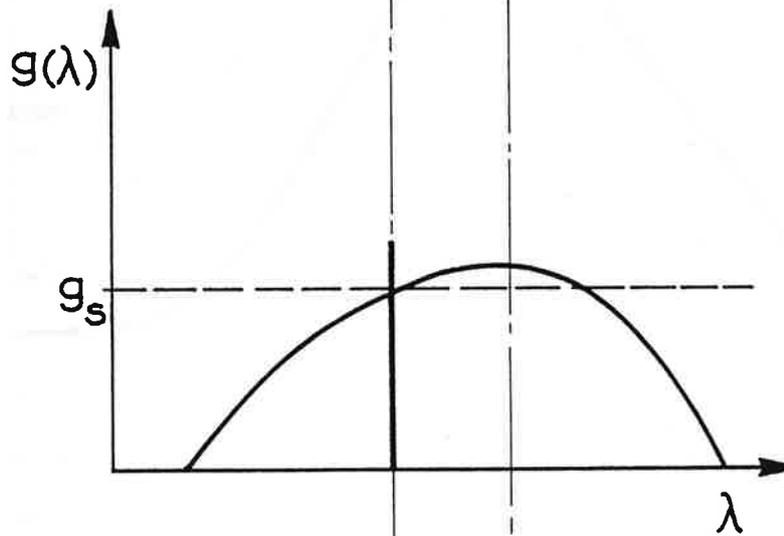
Nous venons de voir qu'un bon fonctionnement nécessitait un $\Delta\lambda$ faible, c'est-à-dire un ajustement entre le mode de la cavité du rayonnement injecté et le mode de la cavité du laser pulsé.

L'accord spectral et spatial de deux cavités est toujours une opération délicate, nous avons donc opté pour un système ne possédant qu'une seule cavité, dans laquelle on réalise une double excitation :

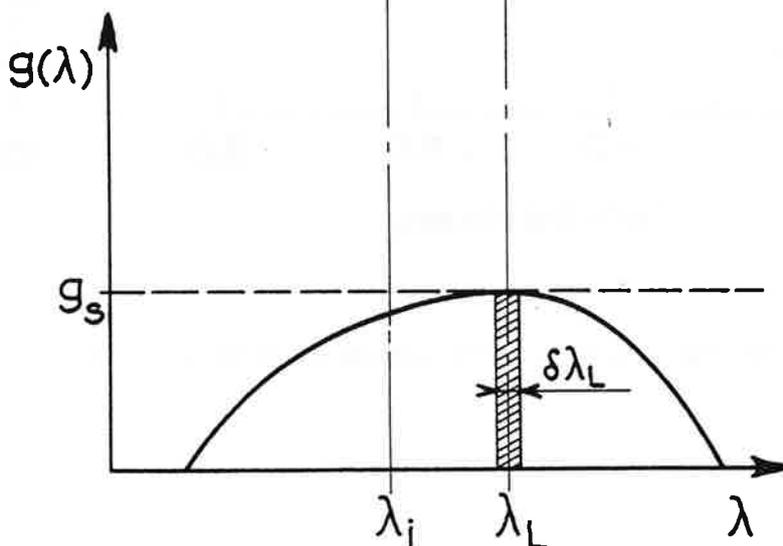
- . une excitation continue par un laser Kr^+ nécessaire à l'oscillation du mode injecté λ_i



a. régime transitoire
sans oscillation laser



b. état intermédiaire
oscillation à λ_i



c. état final
oscillation à λ_L

Figure III-9 : Gain en mode libre et injecté.

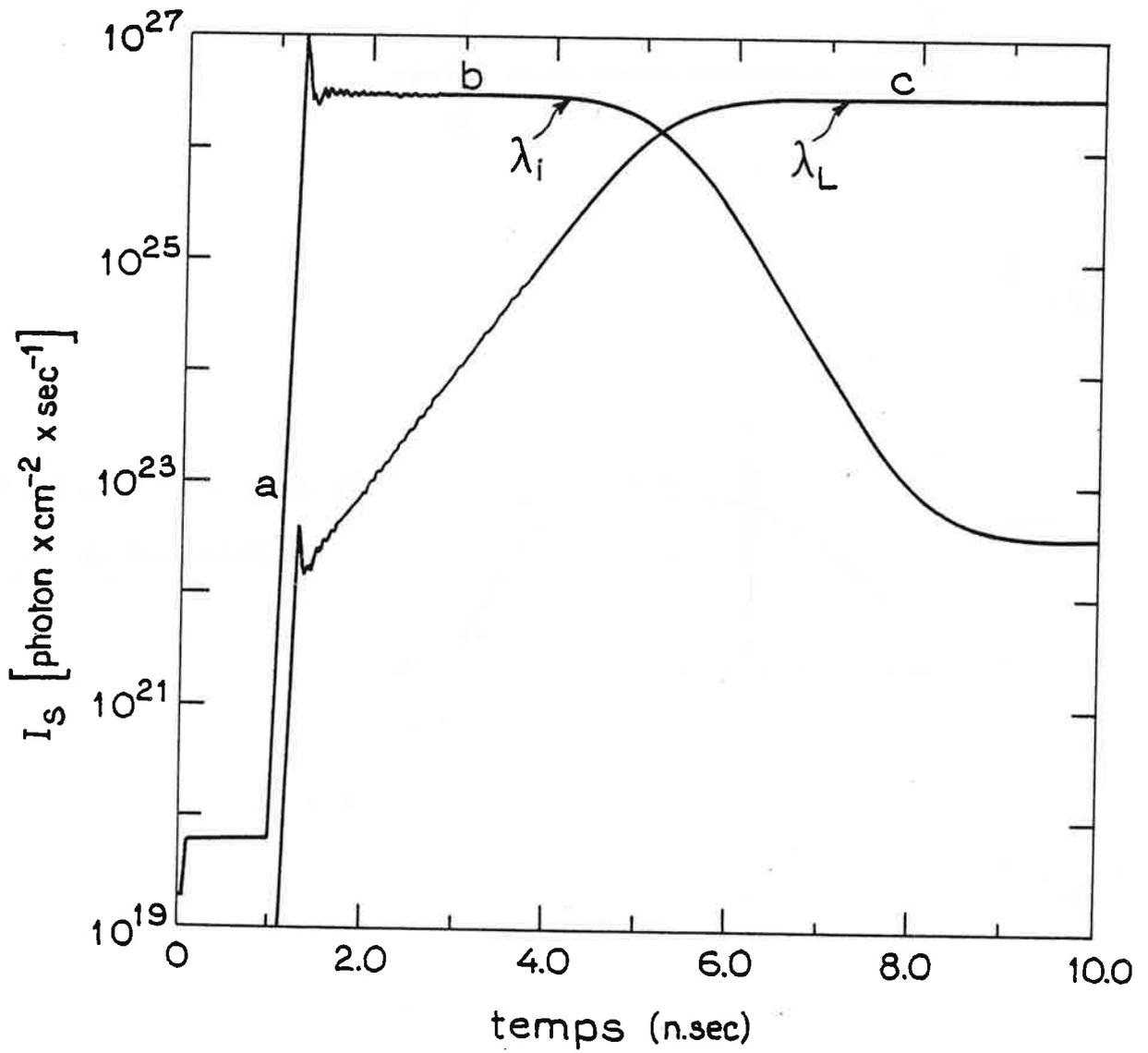


Figure III-10 : Construction de l'oscillation en mode injecté.

- . une excitation pulsée, qui se bloquera sur le mode λ_1 du laser continu.

Un premier système, réalisé au Laboratoire Aimé Cotton comportait une double excitation sur le même milieu amplificateur (jet de colorant).

La nécessité de focaliser les deux excitations sur le jet de colorant entraînait pour de trop fortes excitations pulsées une modification des propriétés optiques du milieu amplificateur et ainsi un déplacement et un élargissement en fréquence de l'impulsion de sortie par rapport à l'oscillation continue.

La solution est de placer un second milieu amplificateur dans la cavité à un endroit où le faisceau gaussien est plus étendu, ce qui permet d'augmenter considérablement la puissance de l'excitation pulsée sans modifier les qualités spectrales du système.

Le seul inconvénient est d'augmenter le seuil d'oscillation du laser continu puisque sans pompage pulsé le milieu présente toujours une légère absorption. Nous allons maintenant décrire ce système.

B - Description du système

La figure III.11 représente un schéma d'ensemble du dispositif.

α - La cavité

La cavité est celle d'un laser à colorant commercial dans laquelle se trouvent deux zones actives : l'une constituée par un jet de colorant excité en régime continu par un laser à krypton ionisé, l'autre constituée par une cellule à colorant excitée par des impulsions lumineuses provenant d'un laser à Yag doublé en fréquence.

Le colorant utilisé pour les deux milieux est la rhodamine 6G qui permet un bon fonctionnement dans le domaine de fréquences désiré (~ 590 nm).

Un mode unique de la cavité est sélectionné par deux éléments :

- . un filtre de Lyot
- . un étalon Fabry Pérot

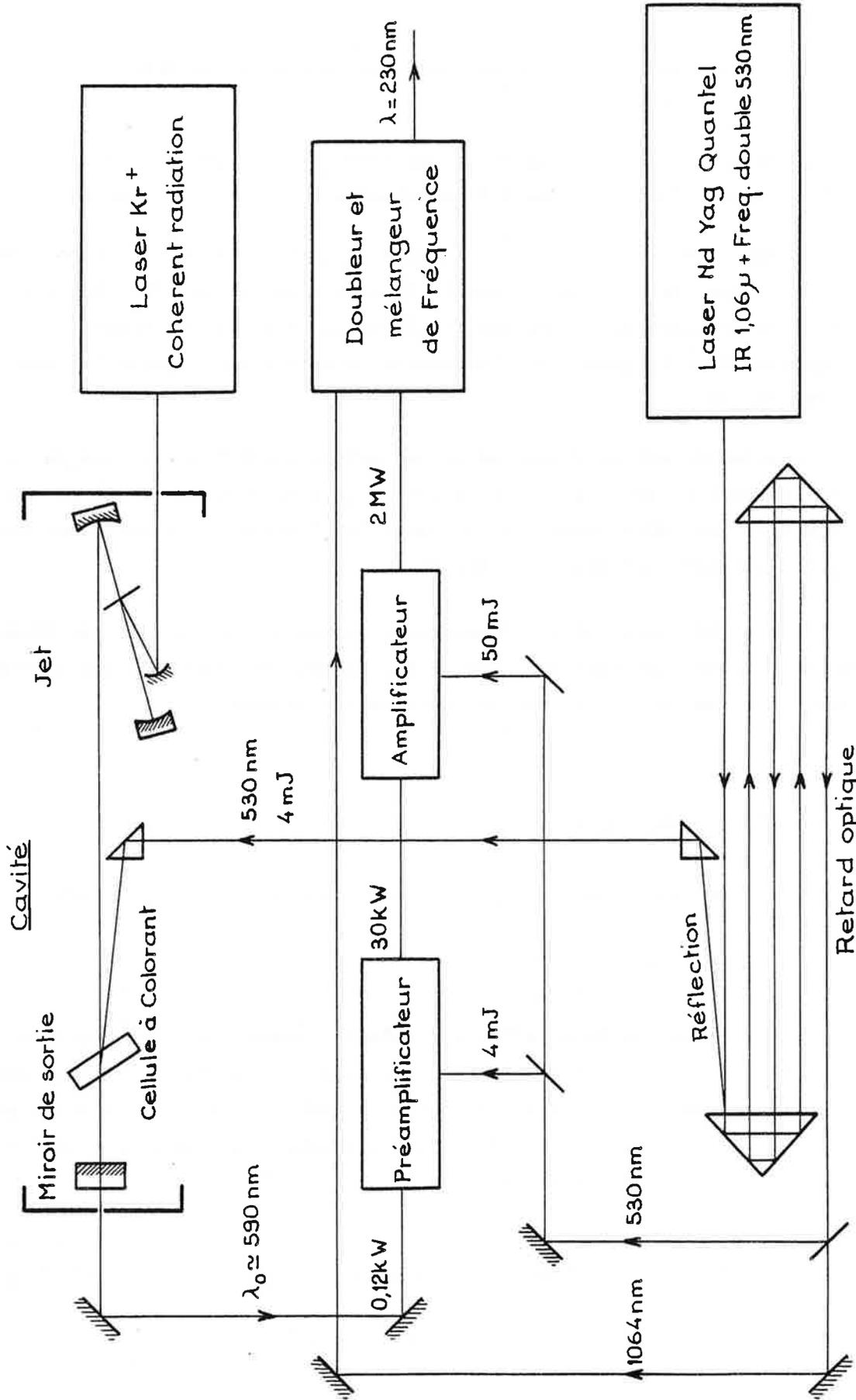


Figure III-11 : -Schéma du dispositif laser-

La figure III.12 montre comment ce mode est sélectionné.

Le miroir de sortie monté sur céramique piézoélectrique permet d'asservir et de balayer la fréquence.

On obtient à la sortie la superposition de la radiation continue et d'impulsions d'une puissance crête de 1 KW, de même qualité optique et spectrale que le continu (limité tout de même par la durée de l'impulsion).

Une partie du faisceau continu est envoyée dans une cellule à iode, on peut enregistrer ainsi le spectre en absorption de cette molécule et grâce à l'Atlas [99] calibrer nos enregistrements.

Le balayage s'opère en appliquant une tension en dents de scie à la céramique piézoélectrique du miroir de sortie, le Fabry Péroth suivant automatiquement grâce à son asservissement.

Au cours des phases ① et ② (voir fig. III.13), l'augmentation de V_c permet un balayage linéaire et simultané du Fabry Péroth interne et de la cavité. Au cours de la phase ③, V_c revient brusquement à zéro, le mode de la cavité, a, reprend sa position initiale et la constante de temps de l'asservissement du F.P.I. étant suffisamment longue, le pic de transmission de l'étalon ne change pas de fréquence.

Le saut de mode de la phase ③ doit avoir lieu exactement lorsque le mode a vient en coïncidence avec le mode b (en phase ①) si on ne veut pas avoir d'irrégularité dans le balayage.

La dynamique du balayage automatique est de plus de 30 GHz (1 cm^{-1}). Un balayage sur une plage plus grande nécessite que l'on modifie périodiquement l'orientation du filtre de Lyot, cela se fait très bien sans perturbation sur le mode laser, on peut effectuer ainsi des balayages sur plus de 240 GHz. Un asservissement et un balayage plus précis peuvent être obtenus grâce à un appareil appelé "sigmamètre" développé au Laboratoire Aimé Cotton [100]. Son principe est celui d'un interféromètre mesurant de manière très précise le nombre d'ondes de la radiation.

On mesure $\phi = 2\pi\sigma\delta$ où δ est la différence de marche fixée de l'interféromètre, σ le nombre d'onde de la radiation connue donc à $k \times \frac{1}{\delta}$ près (k entier).

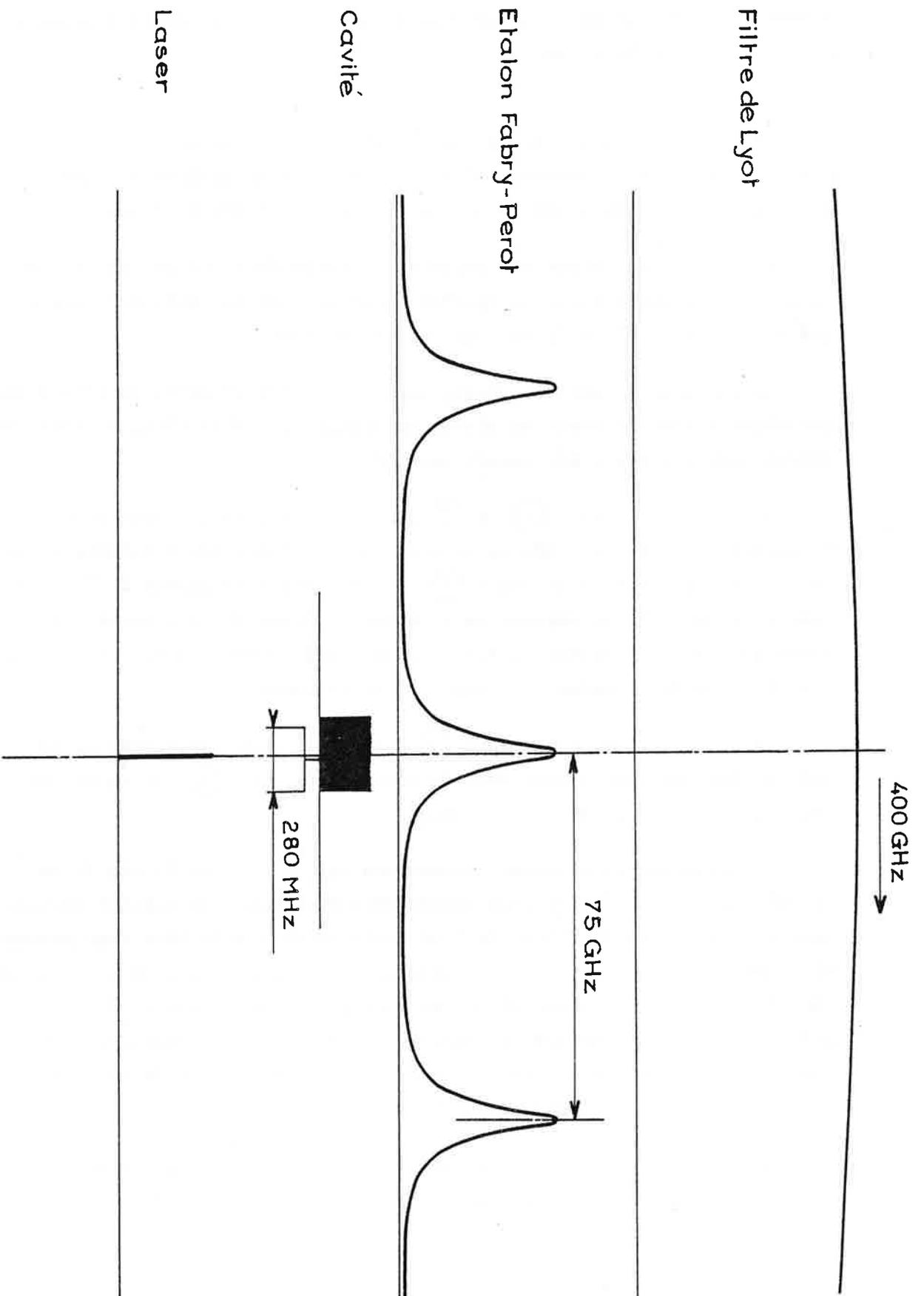


Figure III-12 - Transmission des éléments sélectifs.

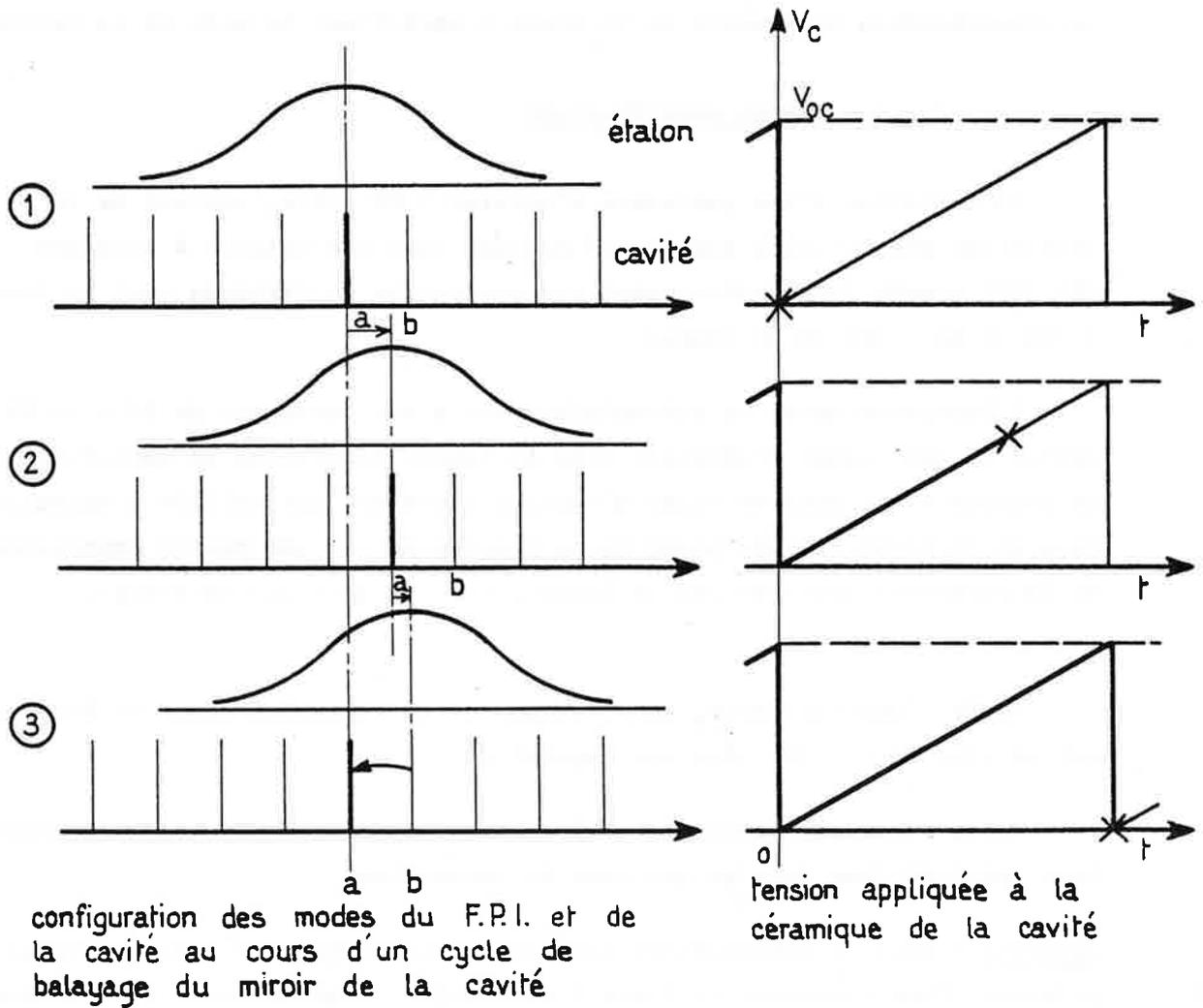


Figure III-13 : Balayage en fréquence du mode laser.

On compare la phase ϕ à une phase électronique ϕ_0 que l'on peut contrôler, et le signal d'erreur est réinjecté dans la boucle d'asservissement.

Outre ce sigmamètre, un mesureur absolu de nombre d'onde, basé sur un principe commun a été mis au point dans notre Laboratoire [101]. Sa précision est de $0,1 \text{ cm}^{-1}$. Cet appareil nous a été d'une très grande utilité à la fois pour le repérage absolu de la longueur d'onde et pour la visualisation permanente de la phase ϕ contrôlant le mode de la cavité.

β - Le système amplificateur.

La radiation d'une puissance d'environ 1 KW crête, sortant de la cavité est préamplifiée par double passage dans une cellule à colorant (Rh 610) pompée longitudinalement par une partie du faisceau vert du laser à Yag (4 mJ \sim 400 kW de pompe).

L'impulsion après ce préamplificateur a une puissance de 20 à 30 kW crête, ce qui permet d'attaquer dans de bonnes conditions un amplificateur de puissance. Ce dernier étage d'amplification est une cellule à circulation de colorant (Rh 66) pompé transversalement par une partie importante de la puissance délivrée par le laser à YAG (50 mJ \sim 3,3 MW crête).

Après l'amplificateur, la puissance de la radiation jaune (\sim 590 nm) est de plus de 1,5 MW crête par impulsion.

Cette puissance permet le doublage de cette fréquence dans des cristaux non linéaires avec un bon taux de conversion.

Remarque : afin de synchroniser dans les amplificateurs l'arrivée des impulsions (l'une provenant du laser à colorant et l'autre étant l'impulsion excitatrice), il a été nécessaire d'introduire sur le trajet du faisceau excitateur une ligne à retard optique (fig. III.11).

γ - Doublage et mélange de fréquences.

Pour atteindre la longueur d'onde dans l'UV (230 nm) nécessaire à l'excitation des états de Rydberg de lithium, nous devons doubler la fréquence du laser à colorant (\sim 590 nm) puis mélanger cette fréquence

doublée (~ 295 nm) à la fréquence fondamentale du laser Nd Yag ($1,06 \mu$). Le schéma du montage doubleur et mélangeur de fréquence est représenté sur la figure III.14.

Le doublage s'effectue dans un cristal d'ADP, les conditions d'accord de phase sont réalisées par rotation du cristal. La puissance de la radiation à 295 nm est de 150 kW crête soit un taux de conversion de 10 % environ.

Les deux faisceaux UV et infrarouge ($1,06 \mu$) sont ensuite superposés dans un cristal d'ADP où l'effectue le mélange. L'accord de phase est cette fois-ci, en portant le cristal à une température d'environ $T = 60^\circ\text{C}$. La puissance de l'impulsion à 230 nm directement utilisable pour l'expérience est de 20 kW environ.

La séparation des trois longueurs d'ondes est réalisée par un prisme en silice.

Une lentille permet de focaliser le faisceau sur la zone d'interaction et la sélection de la polarisation (π ou σ) est obtenue grâce à une lame biréfringente que l'on incline convenablement.

Revenons maintenant sur les caractéristiques spectrales des différentes radiations. La source laser principale (590 nm) possède une largeur spectrale d'environ 55 MHz, limitée surtout par la durée des impulsions (≈ 10 ns). La fréquence doublée possède donc une largeur de 110 MHz.

La qualité spectrale de l'infrarouge du laser Nd Yag intervenant dans le mélange de fréquences est beaucoup moins bonne (~ 1 GHz). Elle serait encore plus grande si un étalon Fabry Pérot n'était pas présent à l'intérieur de la cavité de celui-ci.

Elle limite donc la largeur spectrale de la radiation UV utile (230 nm) à 1 GHz.

Une autre configuration est possible, basée sur les mêmes principes. Elle permet de meilleures performances (150 MHz) mais nécessite des cristaux non linéaires moins usuels. Nous allons la décrire dans le paragraphe suivant.

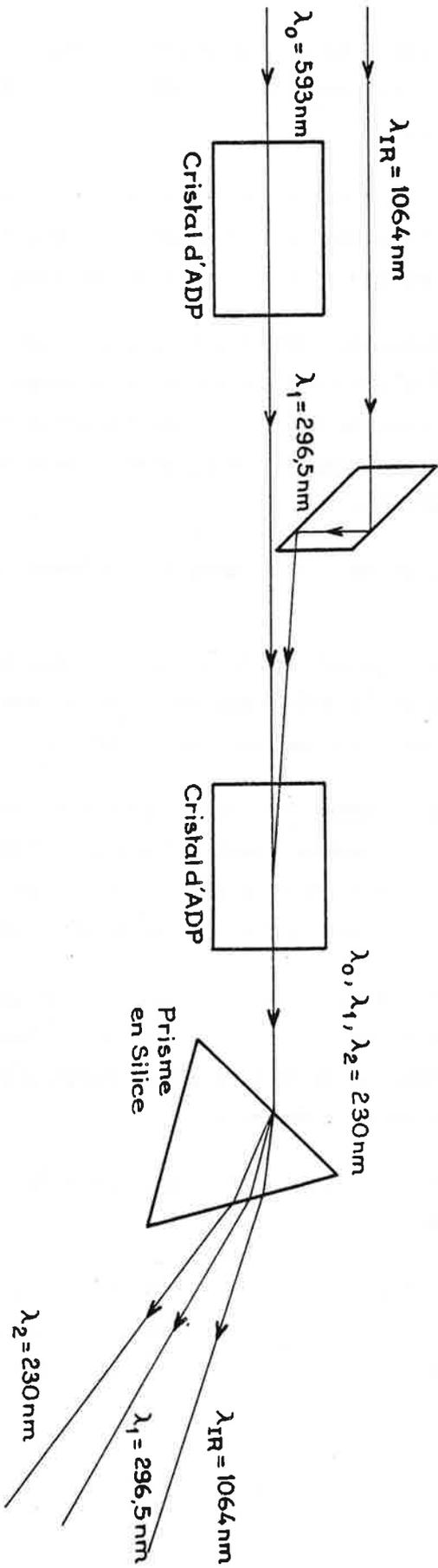


Figure III-14 : - Schéma du montage doubleur et mélangeur de Fréquences -

C - Un système haute résolution

Pour réaliser un tel système, la première idée qui vient à l'esprit est de doubler une source laser monomode fonctionnant à 460 nm, en fait cela pose un certain nombre de problèmes :

1. Dans cette zone de fréquence, les colorants disponibles actuellement sont très loin de leur maximum d'efficacité.
2. Les colorants utilisables nécessitent alors une excitation dans l'ultra-violet avec des sources laser peu fiables. Cela nécessite aussi l'utilisation pour le pompage pulsé d'un mélange supplémentaire de la fréquence du laser Nd Yag afin d'obtenir $\frac{1064 \text{ nm}}{3} = 355 \text{ nm}$.
3. Le cristal doubleur utilisable dans cette région est le KPB qui ne possède pas une grande efficacité (son coefficient non linéaire est plus faible que celui du KDP).

La solution que nous nous proposons d'utiliser consiste à partir de la longueur d'onde 690 nm qui peut être obtenue à l'aide de colorant tel que l'oxazine ou mieux la pyridine. L'excitation de ce dernier colorant possède l'avantage de pouvoir être effectuée par des sources lasers fonctionnant dans le vert.

La longueur d'onde 230 nm sera alors obtenue par successivement un doublage de fréquence du rayonnement à 690 nm puis un mélange de cette radiation résultante avec la radiation fondamentale.

Ces opérations peuvent être réalisées dans un cristal d'urée ($\text{CO}(\text{NH}_2)_2$) qui possède un coefficient de non linéarité 2,5 fois plus élevé que celui de l'ADP. [102]

IV - Mesures

1. Champ magnétique

La stabilité du courant de l'alimentation des bobines supraconductrices est de 0,01 A soit une précision relative de $\frac{\Delta I}{I} = \frac{0,01}{100} = 10^{-4}$ à une intensité de 100 A. Le champ magnétique créé au centre des bobines, proportionnel à ce courant est donc connu avec cette même précision relative.

Cependant pour connaître la valeur absolue de ce champ, il est nécessaire d'avoir accès à la constante de proportionnalité $\alpha = \frac{B}{I}$. Pour cela, le constructeur a effectué un calibrage, mais la précision donnée est de 0,01 T soit une précision relative de $\frac{\Delta B}{B} = \frac{0,01}{4} = 2,5 \cdot 10^{-3}$ à 4 T. Dans les spectres en polarisation σ , la superposition des deux composantes σ^+ et σ^- décalées de $\hbar\omega_c$ nous a permis de vérifier le bon accord entre la valeur expérimentale de l'écart et sa valeur calculée à partir de la calibration du champ.

Nous donnerons donc toujours les valeurs absolues du champ magnétique avec trois chiffres significatifs, exemple : $B = 3,89$ T.

Cependant dans certaines expériences, nous avons effectué des enregistrements à des champs magnétiques très proches et il était nécessaire de conserver la précision relative de 10^{-4} . Pour cela nous avons choisi une valeur de α

$$\alpha = \frac{1,000 \text{ T}}{25,70 \text{ A}} = 0,03891$$

et nous donnons ainsi les valeurs du champ magnétique avec 4 chiffres significatifs, le quatrième ayant une signification relative mais pas absolue.

Notons que, dans certaines expériences, il est nécessaire de connaître le terme paramagnétique, il advient donc une erreur absolue systématique sur ce terme.

2. Energie.

L'échelle en énergie est obtenue grâce à l'enregistrement du spectre d'absorption dans une cellule d'iode de la radiation jaune du système laser (590 nm environ).

La correspondance entre la fréquence repérée ν_J et la fréquence ultraviolette utile pour l'excitation de l'état fondamental du lithium est :

$$\nu_{UV} = 2\nu_J + \nu_{IR}$$

Il est donc nécessaire de connaître avec précision la fréquence IR du laser à YAG. Pour cela on envoie la composante doublée verte dans un spectrographe, on obtient :

$$\lambda_{IR} = 1,0641 \mu\text{m} \pm 10^{-5} \text{ près}$$

$$\sigma_{IR} = 9397,52 \text{ cm}^{-1} \pm 0,09$$

Les valeurs d'énergie absolue sont données à partir de la limite d'ionisation en champ nul (origine d'énergie). Celle-ci correspond à une position précise sur le spectre de l'iode. Elle a pu être calculée de deux façons :

- grâce à la valeur de la longueur d'onde infrarouge et de celle de la limite d'ionisation répertoriée dans les tables [103]
- expérimentalement, grâce à un enregistrement des niveaux de Rydberg nP sans champ magnétique en attribuant un défaut quantique de 0,053 à ces niveaux.

La précision de ces méthodes entraîne une indétermination sur les valeurs des nombres d'ondes dans l'ultraviolet d'environ 50 mK (seconde méthode).

En ce qui concerne les écarts d'énergie $h(\nu_1 - \nu_2)$ soit $2h(\nu_{J_1} - \nu_{J_2})$, ils sont connus avec une bien meilleure précision. Celle-ci dépend de l'erreur sur le pointage des raies à partir du spectre de l'iode et par conséquent de la vitesse de balayage de la fréquence laser.

Dans certaines études expérimentales avec un balayage lent, on a pu obtenir une précision relative de moins de 7 mK ($0,007 \text{ cm}^{-1}$). Comme pour la valeur du champ magnétique, il existe environ un facteur 10 entre la précision absolue et la précision relative. Pour le champ magnétique, nous avons fixé $\alpha = \frac{B}{I}$, ici nous fixons la valeur absolue de la limite d'ionisation sur la raie 535 de l'atlas du spectre de l'iode, c'est-à-dire

$$\sigma_{\text{Jaune}}(E=0) = 17046,4432 \text{ cm}^{-1}$$

Les valeurs de l'énergie seront toujours données en prenant comme origine ce nombre d'ondes en sachant toutefois qu'une erreur systématique constante peut toujours exister.

Chapitre IV

RESULTATS EXPERIMENTAUXIntroduction

Depuis les spectres observés par Garton et Tomkins [21], les résultats des expériences qui ont été réalisées par de nombreuses équipes portent surtout sur deux régions :

- la zone "diamagnétique" où l'interaction diamagnétique est une perturbation par rapport à l'interaction coulombienne.

- la zone des niveaux de "quasi Landau" caractérisée par l'existence d'une pseudopériodicité dans le spectre d'énergie, la pseudopériode étant proportionnelle à la fréquence cyclotron et valant environ $\frac{3}{2}\hbar\omega_c$ à la limite d'ionisation en champ nul.

Comme nous l'avons montré dans le chapitre II, la première zone commence à être bien connue tant par une analyse semi classique que, quantiquement, par des calculs de diagonalisations de l'Hamiltonien, ou de manière plus fondamentale par des méthodes de théorie des groupes.

C'est pourquoi dans un premier temps, nous nous sommes plutôt intéressés à la deuxième zone en espérant éclaircir la présence de modulations et en particulier les conditions de leur apparition.

L'expérience décrite dans la référence [82] montre qu'il s'agit principalement de résonances étroites régulièrement espacées et s'étendant jusqu'à la limite d'ionisation. Dans nos premiers spectres, en polarisation π , permettant d'exciter des états $\pi_z = -1$, nous avons observé effectivement de nombreuses résonances étroites mais sans régularité apparente.

C'est pourquoi nous avons décidé, à ce stade de l'expérience de revenir à une étude systématique de la zone diamagnétique située plus bas en énergie aux champs magnétiques que nous pouvons produire.

Cette zone mieux connue théoriquement nous permet une interprétation simple de nos spectres et nous espérons en augmentant l'énergie passer progressivement à la zone de quasi Landau, en suivant les niveaux d'énergie. Ceci devrait permettre une meilleure compréhension des spectres obtenus au voisinage et au-dessus de la limite d'ionisation sans champ.

Dans des calculs de diagonalisation [67] qui traitent d'une excitation Π ou σ de l'atome d'hydrogène directement à partir de son état fondamental, il apparaît pour les deux polarisations une forme différente des multiplets diamagnétiques.

En polarisation σ , qui permet d'exciter les états $\pi_z = +1$, la force d'oscillateur de la transition vers la composante $K = 1$ est beaucoup plus intense que les autres alors qu'en polarisation Π , qui permet d'exciter les états $\pi_z = -1$, aucune transition dominante n'est visible.

En polarisation σ quand on s'élève en énergie, la composante $K = 1$ reste dominante et donne progressivement naissance aux niveaux de quasi Landau.

En polarisation Π , un phénomène analogue ne se produit pas et l'on observe une multitude de raies étroites sous régularité, et d'intensités comparables.

Ceci peut expliquer d'ores et déjà pourquoi les modulations de type quasi Landau n'ont été observées que pour certains schémas d'excitation, tels que les états $\pi_z = +1$ puissent être peuplés.

Nous allons maintenant décrire l'ensemble de nos résultats expérimentaux obtenus sur l'atome de lithium avec les différents schémas d'excitation que nous avons déduits dans le chapitre III et qui sont très analogues aux schémas décrits ci-dessus pour l'hydrogène.

Le spectre de la figure IV.1 a été obtenu au voisinage de la limite d'ionisation en champ nul, dans un champ magnétique de 2,91 T avec une polarisation de la lumière excitatrice Π . On observe principalement un grand nombre de résonances étroites sans régularité apparente qui s'étendent très loin au delà de la limite $E = 0$. Nous avons ainsi pu voir des raies étroites jusqu'à environ $E = + 120 \text{ cm}^{-1}$.

Dans le but d'interpréter et peut-être de classer les résonances observées, nous avons réalisé des balayages en champ magnétique à plusieurs énergies fixées voisines $E = 0$, $E = 0,355 \text{ cm}^{-1}$, $E = 0,575 \text{ cm}^{-1}$, $E = 1,261 \text{ cm}^{-1}$, $E = 1,636 \text{ cm}^{-1}$, $E = 1,806 \text{ cm}^{-1}$, $E = 2,200 \text{ cm}^{-1}$ et $E = 3,323 \text{ cm}^{-1}$.

Nous n'avons pas représenté ici ces résultats car leur complexité rendait impossible une quelconque interprétation. En particulier suivre un niveau en fonction de l'énergie se révélait très difficile malgré les faibles écarts d'énergie entre deux balayages en intensité B .

En polarisation σ , l'interprétation d'un spectre est conceptuellement moins directe qu'en polarisation Π , puisqu'il est formé de la superposition de deux spectres (σ^+) et (σ^-) identiques et décalés du terme paramagnétique $\hbar\omega_c$. Avec cette polarisation, nous avons pu, à des champs de 3,94 T et 4,89 T, observer des comportements réguliers attribuables aux états de quasi Landau. Nous développerons ce point dans le paragraphe II de ce chapitre.

Maintenant nous allons décrire les observations faites dans la zone diamagnétique. Le grand soin apporté au dispositif expérimental (détection, stabilité des sources lasers) nous a permis d'enregistrer des spectres sur lesquels nous pourrions mesurer simultanément l'énergie et l'intensité relative des raies. Ces qualités, jointes à la bonne résolution spectrale nous a permis aussi d'observer lors de la rencontre de deux niveaux des phénomènes d'anticroisements liés au caractère non hydrogénoïde de l'atome de lithium.

POLARISATION π , $B=2,92\text{ T}$

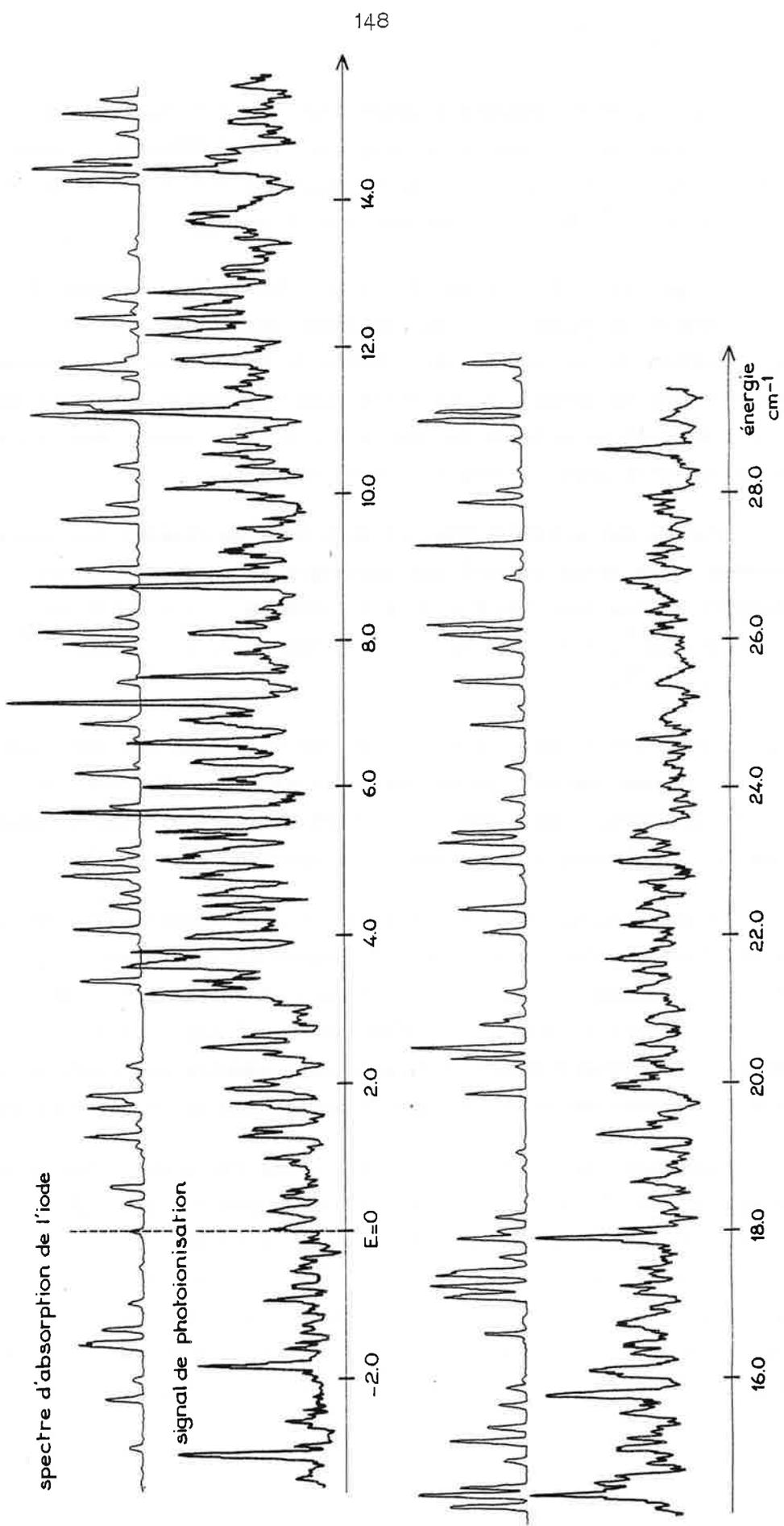


Figure IV-1

Le paragraphe I sera donc consacré à ces résultats. Dans le paragraphe II, nous nous intéresserons à l'évolution vers les états de quasi Landau. Enfin dans le paragraphe III, nous monterons quelques résultats obtenus sur les seuils de photoionisation en présence de champ magnétique.

I - Zone diamagnétique.

Pour cette étude, nous avons balayé en énergie à champ magnétique fixé, une région s'étendant de $E = -115 \text{ cm}^{-1}$ à -80 cm^{-1} , repérée par rapport à la limite d'ionisation en champ nul, et correspondant aux niveaux de Rydberg $n = 30, 31, 32, 33$ en l'absence de champ.

La durée de vie de ces états étant suffisante, tous nos enregistrements ont été effectués en laissant les états formés sortir de la zone d'interaction et s'ioniser dans le champ électrique de la haute tension accélératrice du détecteur (chapitre III, paragraphe III.2).

1. Spectres en polarisation σ , les états $M = +1$ et $M = -1$

Pour ces états le terme paramagnétique vaut $M \frac{\hbar\omega_c}{2}$ soit respectivement $+\frac{\hbar\omega_c}{2}$ et $-\frac{\hbar\omega_c}{2}$. Le nombre M est un bon nombre quantique et deux états de M différents n'interagissent pas. C'est pourquoi apparaît, dans nos spectres expérimentaux, la simple superposition de deux spectres identiques, décalés du terme paramagnétique. Si nous pouvions sélectionner la polarisation σ^+ ou σ^- , nous les observerions indépendamment, c'est pourquoi nous les désignerons par (σ^+) et (σ^-) . Cela complique bien sûr un peu l'interprétation des résonances.

Les balayages en énergie ont été réalisés pour des valeurs du champ magnétique de :

$$B = 0 \text{ T} ; 1,94 \text{ T} ; 2,33 \text{ T} ; 2,72 \text{ T} ; 3,11 \text{ T} ; \\ 3,50 \text{ T} ; 3,89 \text{ T} ; 4,28 \text{ T} ; 4,86 \text{ T}$$

A - Les multiplets diamagnétiques

α - Description

Sur la figure IV-2 nous avons représenté deux des spectres enregistrés.

Le spectre à $B = 2,33$ T montre trois multiplets diamagnétiques bien séparés issus des niveaux de Rydberg sans champ $n = 31, 32, 33$.

Dans le spectre à $B = 3,89$ T, les multiplets commencent à s'interpréter.

Remarque : Nous voyons comment à partir de la présence des deux spectres σ^+ et σ^- décalés de $\hbar\omega_c$, il nous a été possible de calibrer la valeur absolue de l'intensité du champ magnétique (cf. chapitre III, § IV).

Conformément au traitement perturbatif (chapitre II, § III.1.Bα) pour un champ magnétique faible (1,94 T), il apparaît pour chaque espace n un multiplet dont l'énergie de chaque composante est supérieure à l'énergie en champ nul.

On numérote les niveaux par le nombre K par ordre d'énergie décroissante. L'intensité de la composante décroît avec le nombre K , on ne peut voir ainsi qu'environ 7 niveaux par multiplets. Pour les composantes observées, les écarts $E_{n,K} - E_{n,K+1}$ décroissent avec le nombre K .

β - Diagramme d'énergie

Les enregistrements à différents champs magnétiques nous ont permis de tracer un diagramme représentant l'énergie des niveaux en fonction du champ magnétique. Puisque nous nous intéressons surtout à l'influence du terme diamagnétique, nous avons retranché à l'énergie mesurée le terme paramagnétique $E(\sigma^+) - \frac{\hbar\omega_c}{2}$ pour le spectre (σ^+), $E(\sigma^-) + \frac{\hbar\omega_c}{2}$ pour le spectre (σ^-). En fait, nous avons pointé pour une même composante (σ^+) et (σ^-) la valeur de l'énergie, puis nous avons pris la moyenne arithmétique $\frac{E(\sigma^+) + E(\sigma^-)}{2}$, ceci permet de s'affranchir de l'erreur possible sur la valeur absolue du champ magnétique.

POLARISATION σ

spectre d'absorption de l'iode

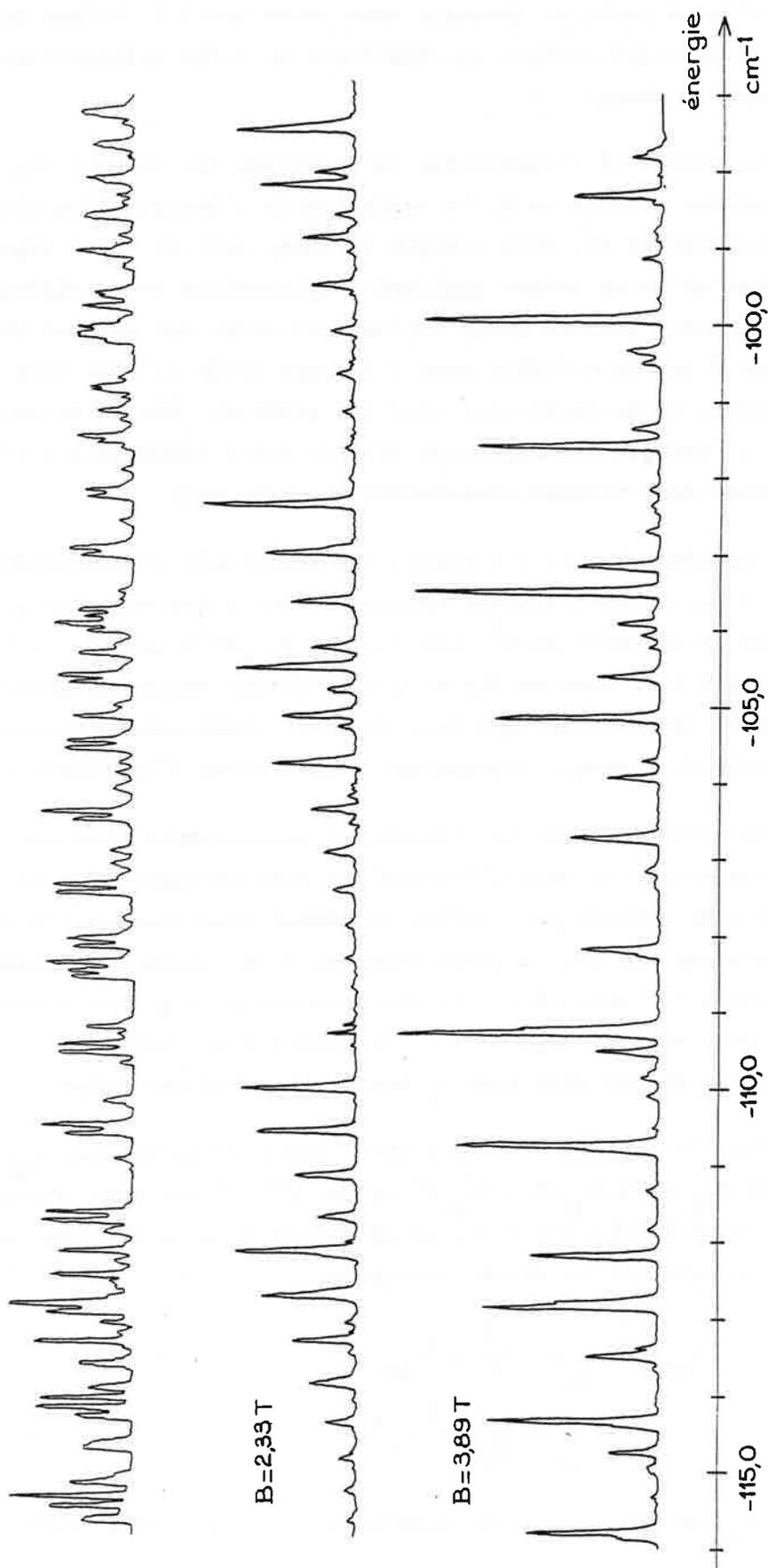


Figure IV-2 : Multiplets diamagnétiques.

D'autre part, en abscisse nous avons porté la valeur du carré du champ magnétique puisque la dépendance du terme diamagnétique est quadratique en champ.

La figure IV.3 représente le diagramme des niveaux (E, B^2) . Pour les faibles valeurs de B , la variation de l'énergie d'un niveau $|n, K\rangle$ est linéaire en B^2 . Puis lorsque le champ devient assez important de telle façon qu'on ne puisse négliger l'interaction de multiplets voisins, la croissance devient moins rapide. Cet effet est surtout visible à n fixé sur les états de K faible dont l'énergie croît le plus vite avec le champ magnétique ; ces états sont donc les premiers influencés par le multiplet $(n+1)$ (l'énergie diamagnétique devient alors comparable à l'écart d'énergie entre deux niveaux consécutifs en champ nul).

Cependant à part cet effet, les multiplets s'interpénètrent sans qu'il y ait de modification apparente dans l'évolution de l'énergie des niveaux en fonction de B^2 . Les droites $E_{n,K}(B^2)$ pour les différentes composantes K d'un même multiplet n se croisent toutes au même endroit du diagramme en champ magnétique nul. Ce point correspond approximativement à l'énergie du niveau correspondant pour l'atome d'hydrogène isolé.

Le niveau nP pour le lithium est sensiblement plus bas en énergie. L'évolution des niveaux d'énergie est donc perturbé dans la zone des champs très faibles par l'effet du défaut quantique de l'état P ($\delta_p = 0,053$). Nous n'avons pas fait d'enregistrement à ces valeurs de champ plus faible que 1,94 T car cela nécessite une beaucoup plus grande résolution expérimentale, nous verrons cependant à des champs plus élevés ($B = 1,94$ T) l'influence du défaut quantique δ_p sur l'intensité des raies.

Dans le tableau IV.1 nous avons reporté les valeurs α_{nK} des pentes des droites $E_{nK}(B) = E_{nK}(0) + \alpha_{nK} B^2$ en $\text{cm}^{-1}/\text{T}^2$. Comme nous l'avons précisé $E_{nK}(0)$ dépend très peu de K , ce qui autorise à écrire dans une approximation hydrogénoïde en unités atomiques :

$$\begin{aligned} E_{nK} &= -\frac{1}{2n^2} + \frac{\gamma^2}{8} \langle \rho^2 \rangle_{nK} \\ &= -\frac{1}{2n^2} + \frac{1}{8} \left(\frac{B}{B_c} \right)^2 \langle \rho^2 \rangle_{nK} \end{aligned} \quad (1)$$

où $\langle \rho^2 \rangle_{nK}$ désigne la valeur moyenne de ρ^2 dans l'état $|n, K\rangle$. La fonction

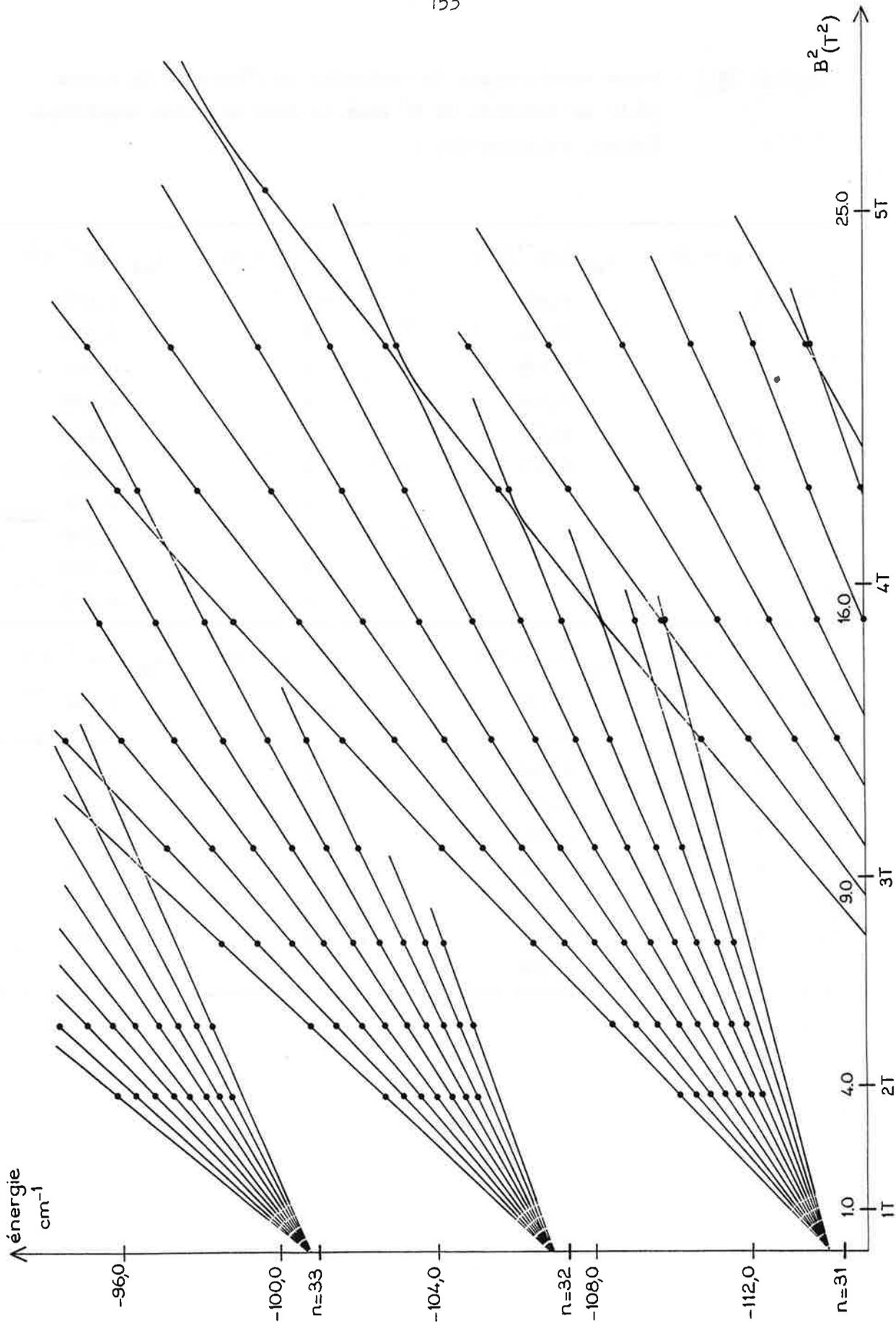


Figure IV-2 : Diagramme représentant l'énergie des niveaux en fonction du champ magnétique en polarisation σ . Les points noirs sont les points expérimentaux, les courbes sont empiriques et permettent de suivre un niveau, les anticroisements tracés ont été étudiés.

TABLEAU IV.1 : Pente représentant la variation de l'énergie du niveau $|n,K\rangle$ en fonction de B^2 dans la zone de champ magnétique faible. Polarisation σ

n = 30	α_{nK} ($\text{cm}^{-1}/\text{T}^2$)	n = 31	α_{nK} ($\text{cm}^{-1}/\text{T}^2$)
K = 1	0,892	K = 1	1,012
2	0,794	2	0,908
3	0,684	3	0,804
4	0,560	4	0,698
5	0,476	5	0,610
6	0,404	6	0,523
		7	0,454
		8	0,376
		9	0,320
		10	0,270
n = 32	α_{nK} ($\text{cm}^{-1}/\text{T}^2$)	n = 33	α_{nK} ($\text{cm}^{-1}/\text{T}^2$)
K = 1	1,132	K = 1	1,294
2	1,008	2	1,172
3	0,890	3	1,042
4	0,784	4	0,920
5	0,684	5	0,818
6	0,590	6	0,706
7	0,532	7	0,624
8	0,436	8	0,540
9	0,376	9	0,456

d'onde ψ_{nK} est considérée à l'ordre 0 et ne dépend donc pas de B, c'est la base limite qui diagonalise simultanément H_0 et ρ^2 à champ nul.

On peut donc relier pour chaque niveau, la pente (en $\text{cm}^{-1}/\text{T}^2$), la valeur moyenne de ρ^2 , grandeur sans dimension, par :

$$\alpha_{nK} = \frac{E_I}{hC} \frac{\langle \rho^2 \rangle_{nK}}{8B_c^2} = \frac{h\omega_c^2}{64\pi E_I C} \langle \rho^2 \rangle_{nK} \quad (2)$$

Pour se rendre compte de la variation de cette valeur moyenne en fonction du nombre K nous avons représenté sur la fig. 4, $\langle \rho^2 \rangle_{nK}/n^4$ en fonction de K/n. Cette représentation a été introduite par les auteurs de la référence [7]. La division par n^4 de $\langle \rho^2 \rangle_{nK}$ a pour but de normaliser cette valeur à celle du modèle de Bohr $r^2 = n^4$. D'autre part le nombre d'états K pour un multiplet de n donné varie environ comme $\frac{n}{2}$. Plus n est grand à B fixé, plus la perturbation diamagnétique se répartit sur un grand nombre de valeurs de K et il semble judicieux de prendre pour abscisse K/n.

Les points s'alignent sur une même courbe et on peut donc écrire :

$$\frac{\langle \rho^2 \rangle_{nK}}{n^4} = f\left(\frac{K}{n}\right) \quad \text{où } f \text{ est indépendant de } n$$

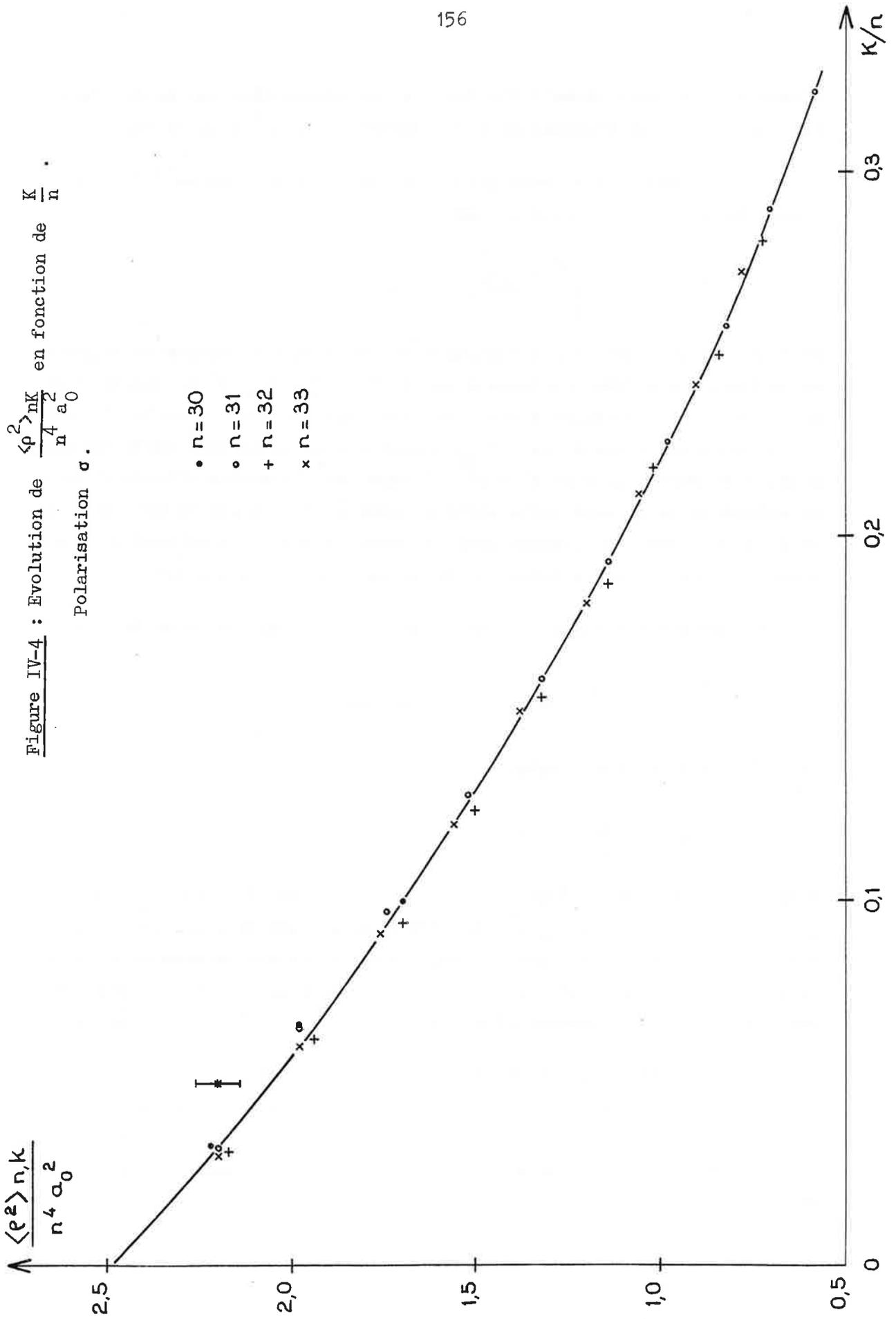
soit encore en unités atomiques :

$$E_{nK} = -\frac{1}{2n^2} + \frac{\gamma^2}{8} n^4 f\left(\frac{K}{n}\right) \quad (3)$$

D'après nos notations, $\frac{K}{n}$ est limité en abscisse par la valeur $\frac{1}{2}$. Pour $\frac{K}{n} \rightarrow 0$, la valeur de $\langle \rho^2 \rangle_{nK}/n^4$ que l'on peut extrapoler à partir de la courbe est $\frac{5}{2}$. Or on sait que $\frac{5}{2}n^4$ représente la valeur moyenne de r^2 maximale dans le modèle hydrogénoïde, pour des états impairs $\ell \geq 1$, elle correspond à un état de moment cinétique nul : $\langle n, \ell=1 | r^2 | n, \ell=1 \rangle = \frac{5}{2}n^2(n^2-5)$.

Ce comportement que nous avons observé expérimentalement pour trois multiplets peut s'étendre. Des calculs [7] ont déjà été faits dans ce sens ; ce type de courbe permet donc de connaître l'évolution d'un niveau $|n, \Pi_z, K, |M\rangle$ quelconque dans la zone de champ faible, dans le sous-espace (Π_z, M) .

Figure IV-4 : Evolution de $\frac{\langle \rho^2 \rangle_{n,k}}{n^4 a_0^2}$ en fonction de $\frac{k}{n}$.
Polarisation σ .



Le nombre K qui jusqu'à présent n'était qu'une manière de numérotter les états prend grâce à cette courbe une signification.

Pour l'état K = 1, et n grand on peut donner l'énergie du niveau en développant la fonction f autour de 0. On obtient pour les états $|M| = 1$ $\Pi_z = +1$.

$$E_{n,K=1} = -\frac{1}{2n^2} + \frac{\gamma^2}{8} \left(\frac{5}{2} - 9,0 \times \frac{1}{n} \right) n^4 \quad (4)$$

résultat formellement analogue à celui de la référence [7] qui donne pour les états impairs, M = a du césium $\Pi_z = 1$

$$E_{n,K=1} = -\frac{1}{2n^2} + \frac{\gamma^2}{8} \left(\frac{5}{2} - 2,235 \times \frac{1}{n} \right) n^4$$

γ - Interprétation théorique

Pour comparer nos résultats expérimentaux à des calculs théoriques, une diagonalisation de l'hamiltonien diamagnétique a été réalisée dans l'espace des états $|n, \ell, M\rangle$ de l'hydrogène en champ nul, avec M = 1, ℓ impair variant de 0 à n-1, et n variant de 27 à 35.

Des calculs analogues ont été menés pour le lithium en tenant compte du défaut quantique δ_ℓ des états de faible moment cinétique ($\delta_p : 0,05$ et $\delta_F, \dots \approx 0$), ce qui modifie les énergies des états en champ nul. De plus la diagonalisation effectuée tient compte de la modification des intégrales radiales diamagnétiques $\langle n\ell | r^2 | n'\ell' \rangle$ et des intégrales de transition dipolaire électrique $\langle 2s | r | np \rangle$, par un calcul explicite utilisant la méthode du potentiel central paramétrique [104].

Pour un champ magnétique donné, la diagonalisation donne l'énergie des niveaux et leurs fonctions d'ondes

$$\psi^i = \sum_{n=27}^{n=35} \sum_{\substack{\ell \text{ impairs} \\ 1 \leq \ell \leq n-1}} a_{n\ell}^i |n, \ell, M=1\rangle \quad \begin{array}{l} i \text{ indiquant les diffé-} \\ \text{rents niveaux} \end{array} \quad (5)$$

La force d'oscillateur de la transition de l'état fondamental vers le niveau ψ_i est proportionnel à $|\langle \psi_{2s} | \vec{R} | \psi^i \rangle|^2$. Les règles de transitions dipolaires électriques en polarisation σ réduisent ce terme à :

$$|\sum_n \langle 2s|r|n,P \rangle a_{nP}^i|^2$$

où le coefficient multiplicatif associé à la partie angulaire de l'opérateur dipolaire électrique $\langle Y_{\ell=0,M=0} | Y_{\ell=1,M=-1} | Y_{\ell=1,M=1} \rangle^2$ a été omis. A champ magnétique faible, dans la zone où deux multiplets voisins sont peu couplés, seul un ensemble de coefficients $a_{n,\ell}$ avec n fixé sont non nuls, les autres $a_{n',\ell}$ étant presque nuls, le niveau est alors noté $|n,K\rangle$, K se substituant à l'indice i pour les états repérés par le même n .

On peut alors écrire $|n,K,M=1\rangle = \sum_{\ell \text{ impairs}} a_{n\ell}^K |n,\ell,M=1\rangle$ en supprimant la sommation sur n .

La force d'oscillateur dipolaire électrique de la transition $|2s\rangle \rightarrow |n,K\rangle$ est alors simplement proportionnelle au carré de la composante P du niveau $|n,K\rangle$, $|a_{nP}^K|^2$. C'est le cas sur la figure IV.5 où nous avons représenté le multiplet $n = 31$ à un champ magnétique de 1,94 T. Au-dessous du spectre expérimental, nous avons placé la position calculée des raies et leur intensité pour le lithium, puis pour l'hydrogène.

L'intensité du signal ne nous permet d'observer que les 7 premières composantes du multiplet qui en comporte 15.

L'accord entre théorie et expérience est très bon pour ces premières composantes aussi bien en ce qui concerne les énergies que les intensités.

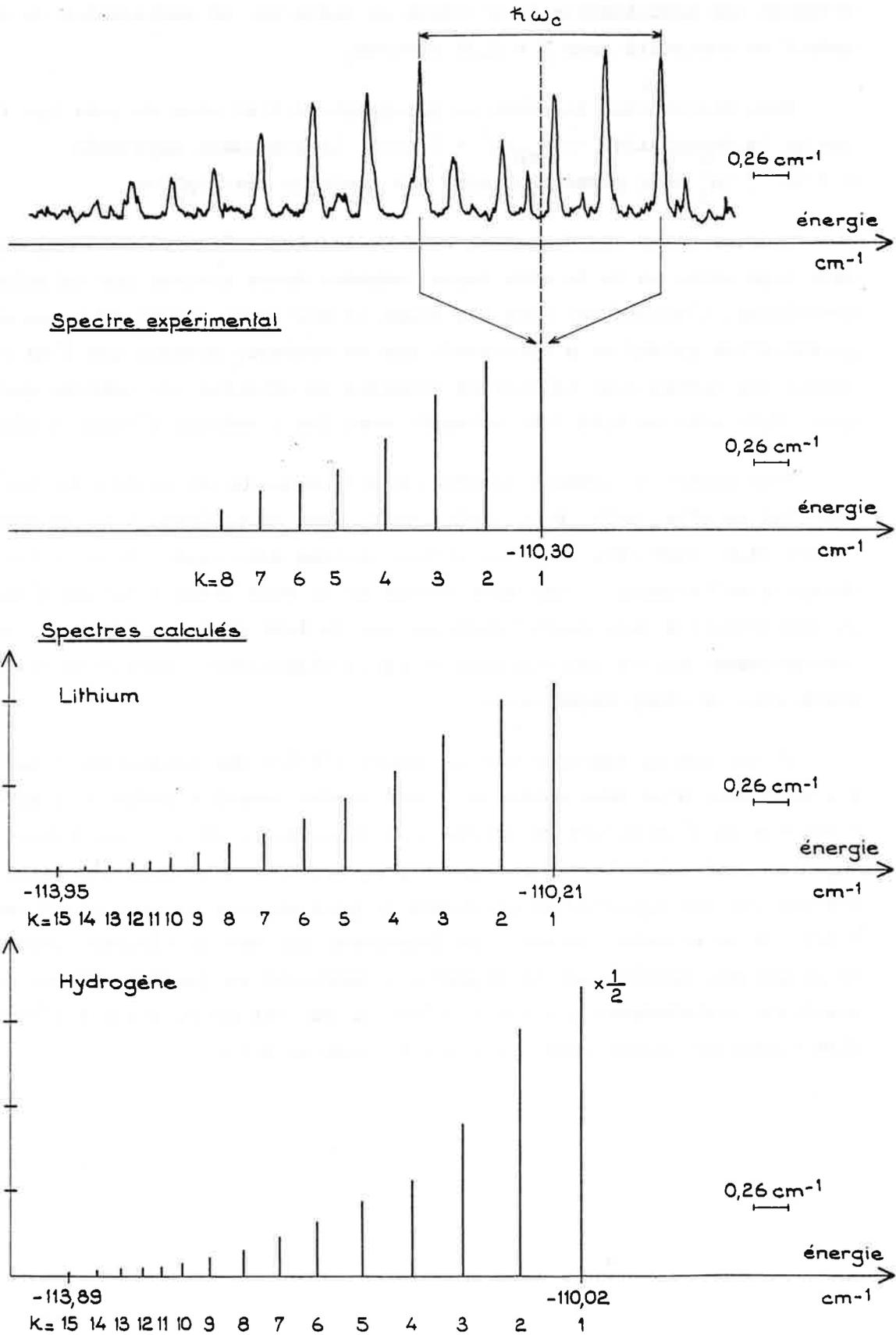
L'effet du défaut quantique du niveau P est très important en ce qui concerne les intensités : pour le lithium les raies $K = 1$ et $K = 2$ ont sensiblement la même intensité alors que pour l'hydrogène le rapport des intensités est environ 1/2.

Pour ce champ magnétique, le niveau $K = 1$ appartient à 97 % au multiplet $n = 31$, c'est-à-dire que $\sum_{\ell \text{ impairs}} |a_{n=31,\ell}^{K=1}|^2 = 0,97$, nous sommes dans une zone où les états de n différents interagissent très peu ("inter ℓ -mixing").

En observant sur le calcul théorique l'écart entre deux composantes consécutives, on s'aperçoit qu'il décroît de $K = 1$ à $K = 11$ puis pour les raies de très faible intensité, invisibles sur nos spectres, il croît jusqu'à la dernière raie du multiplet.

Figure IV-5

OBSERVATION DU MULTIPLET $n=31$ EN POLARISATION σ
 ($B=1,94 T$)



C'est pourquoi, la courbe que nous avons tracée doit être complétée pour les états de K élevés. Le resserrement des niveaux entrainera successivement une modification de l'allure de celle-ci, en particulier un changement de concavité pour $\frac{K}{n} = 0,35$ environ.

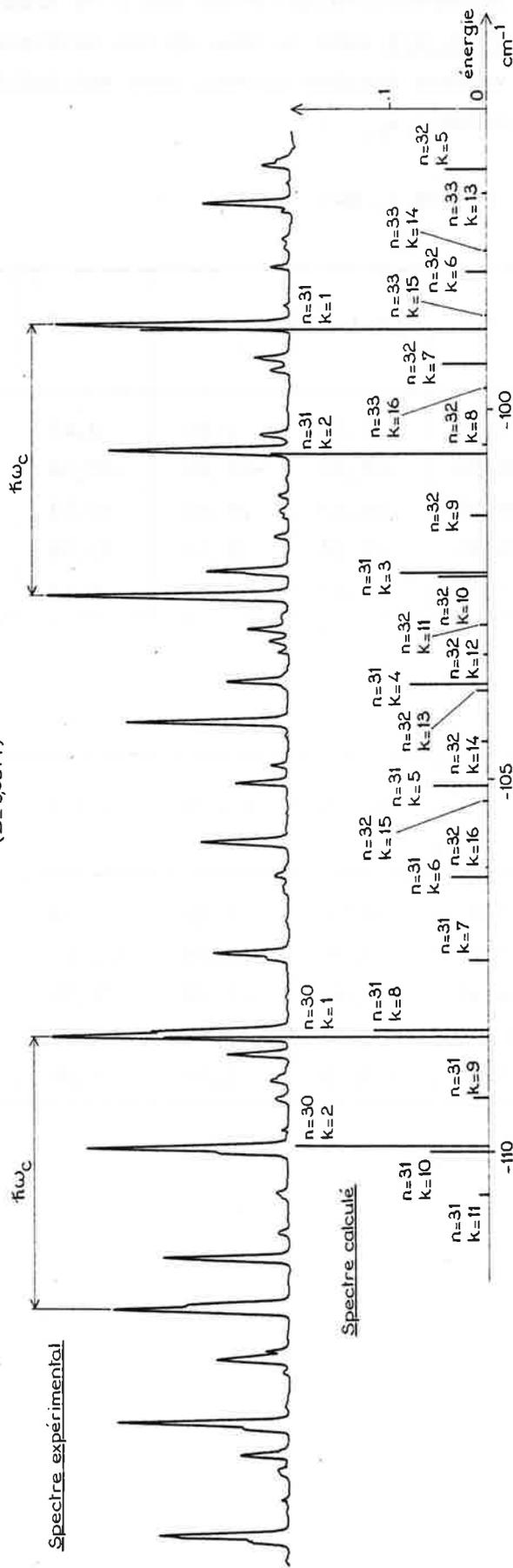
Nous discuterons ce point au paragraphe I.3 et nous verrons les limites de la description $\langle \rho^2 \rangle_{nK} / n^4 = f(K/n)$. La constante approchée $A = 4a^2 - 5a_z^2$ nous permettra alors une nouvelle description.

Pour un champ magnétique de 3,89 T, les multiplets se sont mélangés, mais nous avons pu de la même façon comparer notre spectre aux calculs théoriques. L'accord est très bon comme le montre la figure IV.6. La diagonalisation permet de s'apercevoir que de nombreux niveaux que l'on suit depuis des champs plus faibles et auxquels on attribue les nombres quantiques $|n, K\rangle$ sont en fait très mélangés avec les n voisins ("inter n mixing").

Pour donner un exemple concret, nous donnons la décomposition des niveaux que l'on appelle $|n=31, K=1\rangle$ $|n=31, k=2\rangle$, dans le tableau IV.2. La numérotation $|n, K\rangle$ justifiée pour les champs faibles sera conservée pour les champs plus intenses. Comme nous venons de le voir cette notation n'est qu'approximative mais reste cohérente par le fait même que l'on peut expérimentalement suivre continuellement de façon adiabatique l'évolution des niveaux avec le champ magnétique.

Il est bon de rappeler que la mesure précise des intensités relatives à l'intérieur d'un même multiplet a été rendue possible grâce à la bonne stabilité de l'intensité du rayonnement ultraviolet délivré par notre laser. Cependant cette stabilité se dégrade progressivement lorsque les balayages portent sur des intervalles spectraux de plus en plus larges, et il reste difficile de pouvoir comparer des intensités sur des multiplets différents. Un dispositif normalisant le signal à l'intensité du laser donnerait des résultats certainement meilleurs. C'est ce qui est prévu grâce à l'acquisition numérique actuellement en cours de mise au point.

Figure IV-6
COMPARAISON DU SPECTRE EXPERIMENTAL ET DU SPECTRE CALCULE POUR LES ETATS M=1
(B=3,891T)



Sur le spectre théorique ne figurent que les états $M=+1$, alors que sur le spectre expérimental on observe les états $M=+1$ et $M=-1$. On a tenu compte sur le spectre théorique du terme paramagnétique afin d'assurer les coïncidences sur la figure.

TABLEAU IV.2 : Décomposition des états que l'on nomme n=31, K=1 et n=31, K=2 dans la zone où les multiplets interfèrent. Les valeurs données doivent être multipliées par 10^{-2} pour obtenir $a_{n\ell}$

n=31, K=1 B=3,89 T, M=1

$\begin{array}{c} \ell \\ \backslash \\ n' \end{array}$	$\ell = 1$	$\ell = 3$	$\ell = 5$	$\ell = 7$	Pourcentage en n' : $\sum_{\ell} a_{n',\ell} ^2$
$n' = 29$	5,55	5,14	3,95	2,67	0,8 %
$n' = 30$	-32,50	-28,92	-22,89	-15,56	27,2 %
$n' = 31$	36,22	30,97	26,62	17,51	34,3 %
$n' = 32$	29,85	28,58	19,01	15,18	26,0 %
$n' = 33$	17,41	11,61	14,59	5,41	8,9 %

n=31, K=2

$\begin{array}{c} \ell \\ \backslash \\ n' \end{array}$	$\ell = 1$	$\ell = 3$	$\ell = 5$	$\ell = 7$	Pourcentage en n' : $\sum_{\ell} a_{n',\ell} ^2$
$n' = 29$	- 2,95	- 0,70	2,25	4,14	0,6 %
$n' = 30$	21,98	7,37	-10,59	-22,7	24,7 %
$n' = 31$	-28,81	-12,63	11,70	28,70	38,3 %
$n' = 32$	-24,07	- 3,78	6,39	12,64	27,0 %
$n' = 33$	-11,86	- 2,10	2,19	6,98	7,6 %

B - Les anticroisements

α - Observation

Sur le spectre à $B = 3,89$ T, nous avons observé un épaulement sur la raie la plus intense $|n=30, K=1\rangle$. Cet épaulement se reproduisant identiquement sur les deux spectres (σ^+) et (σ^-), il ne pouvait donc s'agir d'un phénomène parasite. Nous nous sommes donc intéressés de plus près à cette région d'énergie. En suivant l'évolution des niveaux sur le diagramme (E, B^2) on a pu déterminer qu'à cet endroit devait aussi se trouver le niveau $|n=31, K=8\rangle$. Cependant l'intensité de la raie correspondante aurait dû être si faible qu'elle ne pouvait expliquer simplement l'épaulement observé.

Une explication possible est que les deux niveaux lors de leur rapprochement interagissent et subissent ce que l'on appelle un anticroisement. Pour pouvoir étudier ce phénomène d'anticroisement, nous nous plaçons dans un modèle à deux niveaux. Pour des intensités du champ magnétique B très différentes de la valeur $B_0 \sim 3,89$ T caractéristique de l'anticroisement les fonctions d'onde φ_1 et φ_2 des deux niveaux $|n=30, K=1\rangle$ et $|n=31, K=8\rangle$ peuvent être considérées comme pures. Par contre pour des intensités B voisines de B_0 , les fonctions réelles des deux états ψ_1 et ψ_2 se perturbent et on peut écrire :

$$\psi_1 = a(B)\varphi_1 + b(B)\varphi_2 \quad \text{avec } a^2 + b^2 = 1 \quad (6)$$

$$\psi_2 = -b(B)\varphi_1 + a(B)\varphi_2$$

où les coefficients a et b dépendent de B et varient rapidement au voisinage de B_0 . (Pour B très différent de B_0 $|a| = 1$, $|b| = 0$, pour $B = B_0$ $|a|^2 = |b|^2 = 1/2$). Les deux niveaux ψ_1 et ψ_2 ne peuvent se croiser et la valeur minimale de leur différence d'énergie ΔE_{12} est appelée largeur de l'anticroisement, ΔE_{12} est proportionnel à l'intensité de l'interaction couplant les deux niveaux considérés. Si cette largeur est faible, les effets sur la position en énergie des raies sont difficiles à mettre en évidence.

Par contre les effets portant sur les intensités relatives des deux transitions sont spectaculaires [105]. En effet les deux niveaux ψ_1 et ψ_2 sont excités à partir du niveau fondamental φ_0 et les intensités I_1 , I_2 des deux transitions dipolaires électriques sont proportionnelles à :

$$\begin{aligned}
 I_1(B) &\propto \left[a(B)\langle\varphi_0|\vec{r}|\varphi_1\rangle + b(B)\langle\varphi_0|\vec{r}|\varphi_2\rangle \right]^2 \\
 I_2(B) &\propto \left[-b(B)\langle\varphi_0|\vec{r}|\varphi_1\rangle + a(B)\langle\varphi_0|\vec{r}|\varphi_2\rangle \right]^2
 \end{aligned}
 \tag{4}$$

Compte tenu des phénomènes d'interférence apparaissant dans le calcul des intensités I_1 , I_2 , ces intensités varient très rapidement quand B varie au voisinage de la valeur B_0 caractéristique de l'anticroisement. Lorsque les intensités des deux transitions non perturbées (B très différent de B_0) sont égales $|\langle\varphi_0|\vec{r}|\varphi_1\rangle|^2 = |\langle\varphi_0|\vec{r}|\varphi_2\rangle|^2$, au passage de l'anticroisement $B = B_0$, l'intensité d'une des transitions s'annule, celle de l'autre transition devenant deux fois plus intense que celles des raies non perturbées. Ce phénomène a été mis en évidence dans l'étude expérimentale de l'anticroisement de deux niveaux du lithium sous l'effet d'un champ électrique statique homogène [59]. Dans le cas que nous étudions l'un des deux niveaux non perturbés n'est que très faiblement excité $|\langle\varphi_0|\vec{r}|\varphi_2\rangle|^2 \sim 0$. Au voisinage de l'anticroisement les deux intensités $I_1(B_0)$ et $I_2(B_0)$ seront du même ordre de grandeur. L'intensité de la transition la moins intense $|n=31, K=8\rangle$ sera donc renforcée par le phénomène d'anticroisement et ceci au détriment de l'intensité de la transition la plus intense $|n=30, K=1\rangle$.

Pour étudier ce phénomène, nous avons réalisé des balayages en énergie beaucoup plus lente à des champs magnétiques très rapprochés sur une zone du diagramme (E, B^2) couvrant l'anticroisement.

De $B = 3,856$ T à $B = 3,949$ T nous avons étudié l'anticroisement $\psi_1 = |n=30, K=1\rangle$ avec $\psi_2 = |n=31, K=8\rangle$. Puis nous avons entrepris une étude systématique des anticroisements du niveau $\psi_1 = |n=30, K=1\rangle$ avec les niveaux du multiplet supérieur $n = 31$ soit $\psi_2 = |n=31, K=7\rangle, |n=31, K=6\rangle, |n=31, K=5\rangle$.

L'évolution des niveaux que nous avons reportés dans le diagramme (E, B^2) (Fig. IV.3) nous permet de localiser la position des différents anticroisements aussi bien en énergie qu'en champ magnétique.

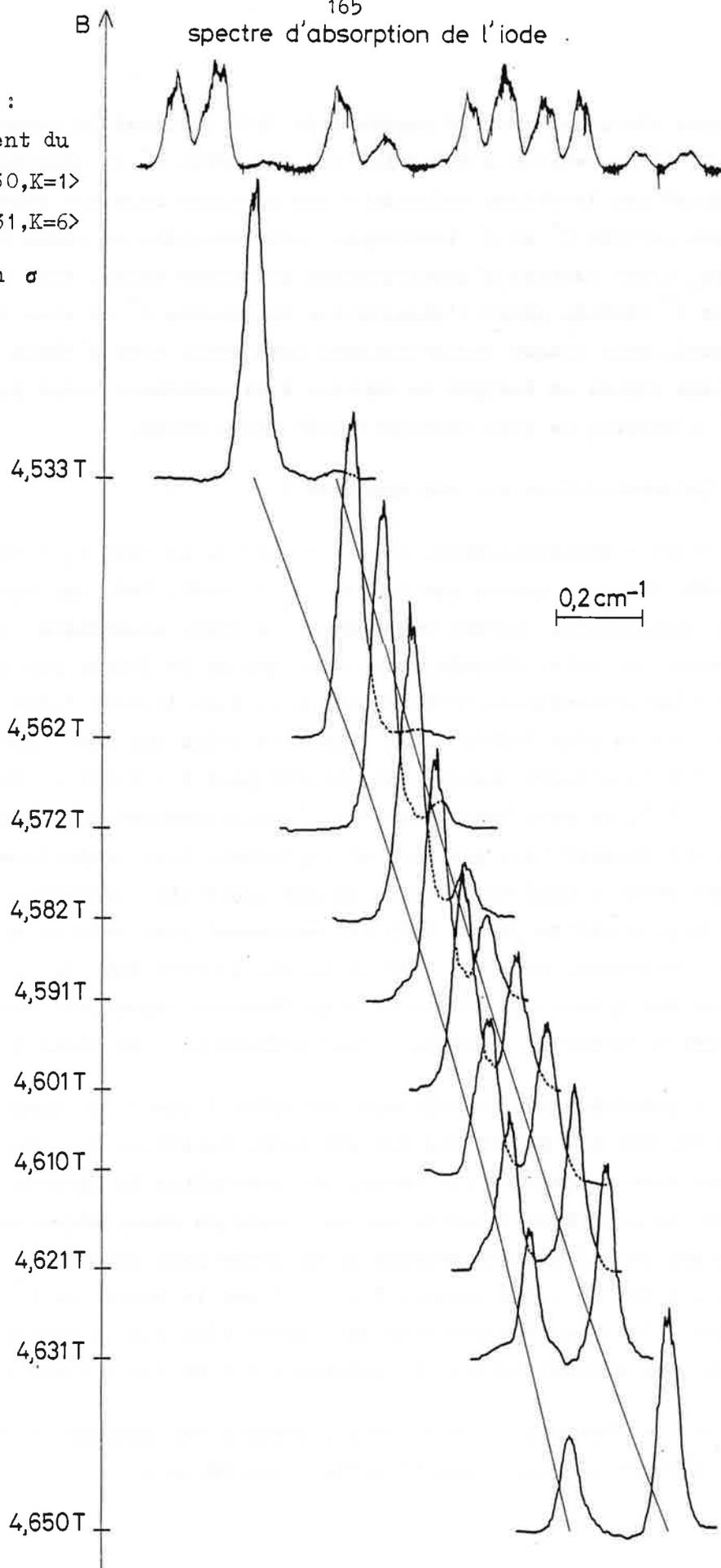
Dans tout ce paragraphe, nous noterons ψ_1 et ψ_2 les fonctions d'ondes des niveaux subissant un anticroisement, la largeur sera notée ΔE_{12} .

Sur la figure IV.7, nous avons représenté l'anticroisement de $\psi_1 = |n=30, K=1\rangle$ avec $\psi_2 = |n=31, K=6\rangle$ observé à partir d'enregistrements effectués aux champs magnétiques B variant de 4,51 T à 4,65 T. Ce sont les

spectre d'absorption de l'iode

Figure IV-7 :

Anticroisement du

niveau $|n=30, K=1\rangle$ avec $|n=31, K=6\rangle$ Polarisation σ 

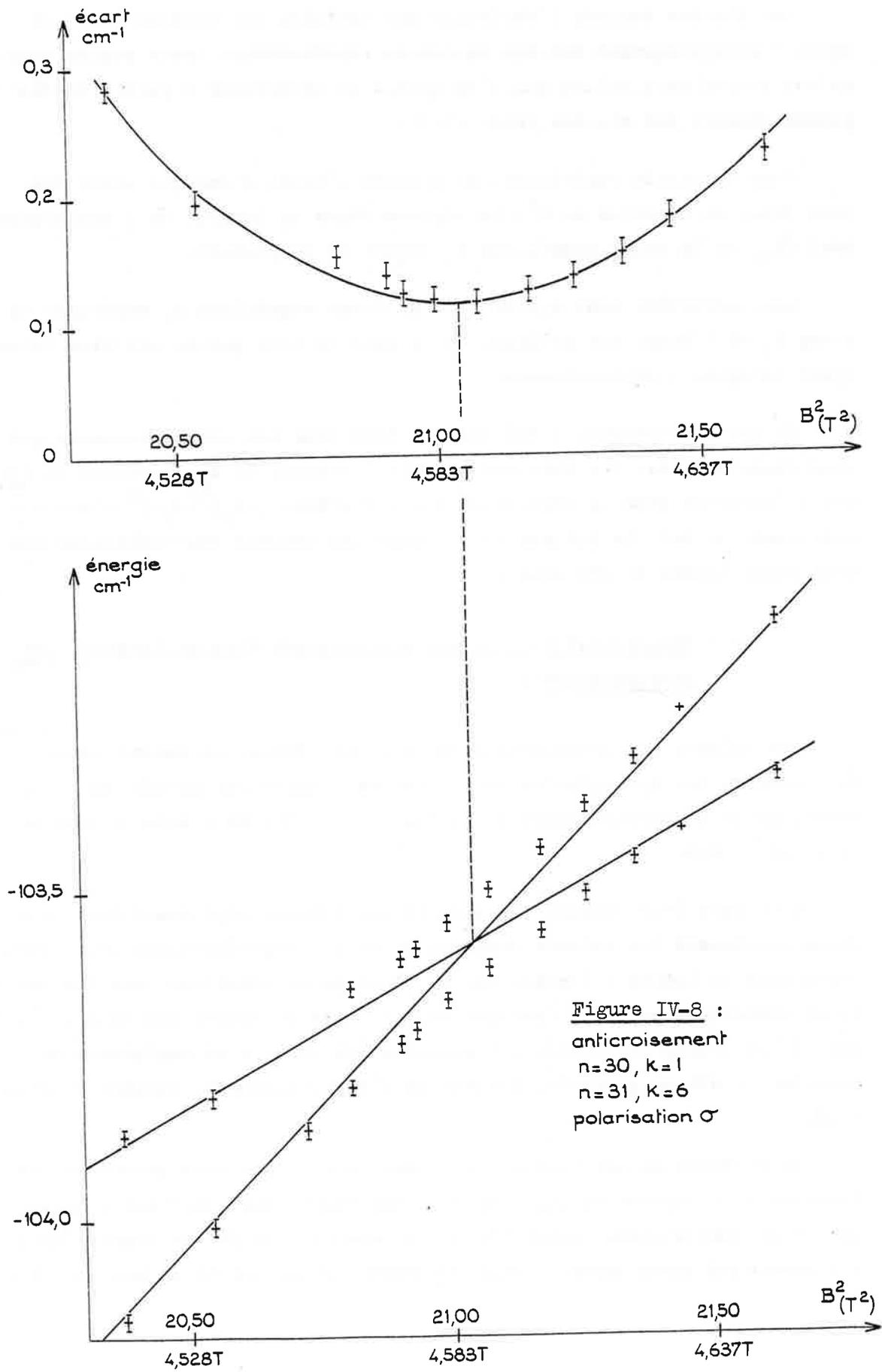
spectres réels qui ont été représentés (ils incluent le terme paramagnétique). L'observation a été faite sur la partie σ^+ du spectre, ce choix est dicté par la raison suivante : nos spectres sont une superposition de deux parties σ^+ et σ^- identiques mais décalées du terme paramagnétique $\hbar\omega_c$; ces parties n'interagissent pas entre elles, mais des résonances en σ^+ peuvent gêner l'observation du spectre σ^- et vice versa. C'est pourquoi, pour chaque anticroisement nous avons tout d'abord réalisé un balayage rapide en énergie de manière à sélectionner entre les parties σ^+ et σ^- l'endroit le plus favorable pour notre étude.

Qu'observe-t-on sur ces spectres ?

Avant l'anticroisement, pour $B = 4,51$ T, la raie $\psi_1 = |n=30, K=1\rangle$ est très intense, tandis que la raie $\psi_2 = |n=31, K=6\rangle$ est très peu intense, voire inobservable. Lorsqu'on augmente le champ magnétique, l'écart en énergie entre les raies décroît moins vite que ne le laisse prévoir leur pente avant l'anticroisement, l'intensité de la raie la plus forte décroît, celle de la raie la plus faible croît. Les deux raies ont même intensité pour $B = 4,610$ T. L'écart minimum est observé pour $B = 4,591$ T. Enfin pour $B = 4,650$ T, on peut considérer que l'anticroisement est terminé, les deux raies ont échangé leur position et reprennent leur comportement qu'elles avaient avant l'anticroisement. Une particularité cependant persiste, la raie la plus petite $|n=31, K=6\rangle$ est nettement plus intense après qu'avant l'anticroisement. Ceci est sans doute lié au fait que les interactions entre les multiplets de valeurs de n différentes augmentent avec l'intensité du champ B étudié ; le modèle à deux niveaux utilisé cesse d'être valable.

La précision sur le pointage des raies à partir du spectre de l'iode a été évaluée à 7 mK. Toutes les positions relatives des niveaux sont donc connues avec cette même précision, en particulier la largeur de l'anticroisement. La précision relative sur la valeur du champ magnétique est de 10^{-4} . Cependant la calibration absolue de ce champ peut introduire une erreur systématique sur le terme paramagnétique et sur la valeur de B^2 portée en abscisse. Cette erreur entraîne une imprécision sur la position absolue en énergie des niveaux nettement supérieure à 7 mK (voir chapitre III, § IV).

Sur la figure IV.8 on a porté l'énergie des niveaux en fonction de B^2 en ne prenant en compte que le terme diamagnétique.



Les droites donnant l'évolution des énergies des niveaux avant et après l'anticroisement ont été également représentées. Leurs pentes sont en bon accord avec celles que l'on aurait pu déterminer à partir du diagramme général des niveaux (Fig. IV.3).

Dans la partie supérieure, on a tracé l'écart d'énergie entre les deux raies en fonction de B^2 . Le minimum donne la largeur de l'anticroisement ΔE_{12} et le champ magnétique B_1 auquel il se produit.

Les intensités sont égales pour un champ magnétique B_2 supérieur au champ B_1 où l'écart est minimum, et la raie la plus petite est plus intense avant qu'après l'anticroisement.

Un tel comportement a été observé dans tous les anticroisements que nous avons étudiés. (Le fait que B_1 soit différent de B_2 , provient du fait que l'intensité pour la transition non perturbée, $|\langle \varphi_0 | \vec{r} | \varphi_2 \rangle|^2$ n'est pas exactement nulle). Le tableau IV.3 résume les données expérimentales que nous avons tirées de nos études.

β - Interprétation : effets non hydrogénoïdes et largeurs des anticroisements

Des calculs par diagonalisation de l'Hamiltonien en tenant compte du caractère non hydrogénoïde de l'atome de lithium ont permis une étude théorique de l'anticroisement du niveau $\psi_1 = |n=30, K=1\rangle$ avec le niveau $\psi_2 = |n=31, K=8\rangle$.

La figure IV.9 compare ces calculs aux données expérimentales. Nous avons représenté les valeurs absolues d'énergie expérimentales avec notre choix pour la limite d'ionisation. Un décalage systématique avec les positions théoriques apparaît (environ 50 mK), nous ne devons pas nous en étonner. Si on ajuste les données, l'accord entre théorie et expérience est excellent : allure générale, largeur de l'anticroisement, rapport d'intensité.

On retrouve en particulier les comportements que nous avons mis en évidence : intensités égales pour un champ magnétique supérieur à celui où l'écart est minimum, intensité de la raie la plus faible avant l'anticroisement qui garde après l'anticroisement une intensité un peu plus forte.

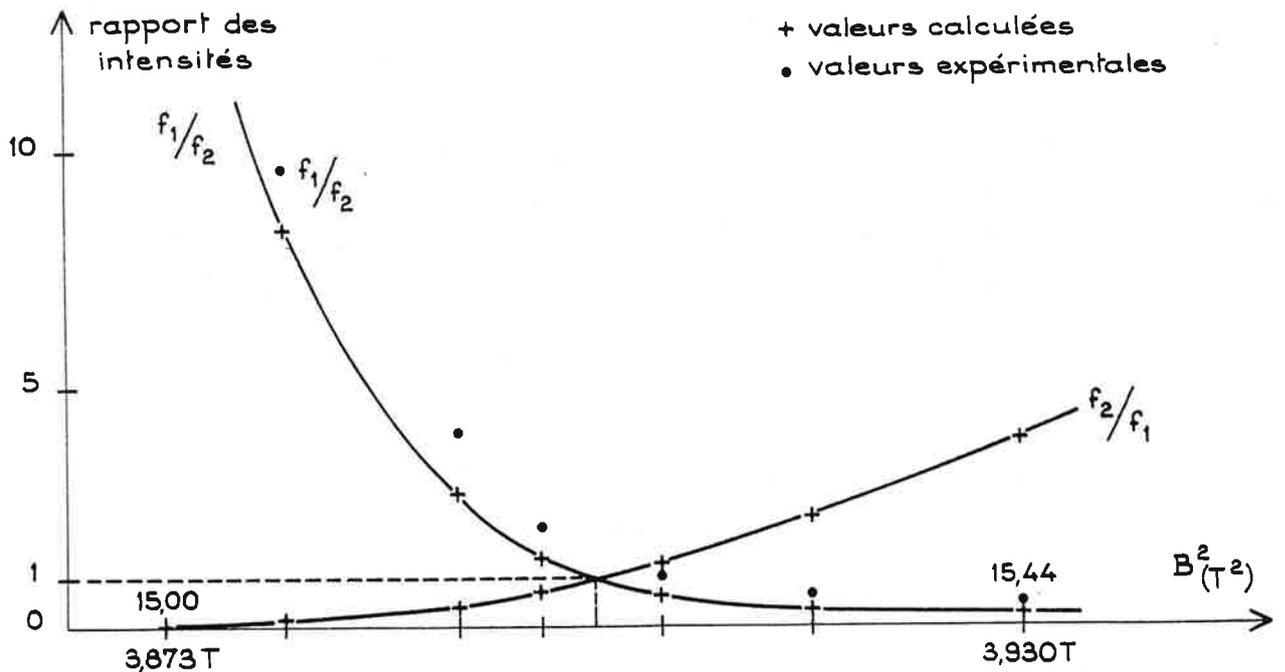
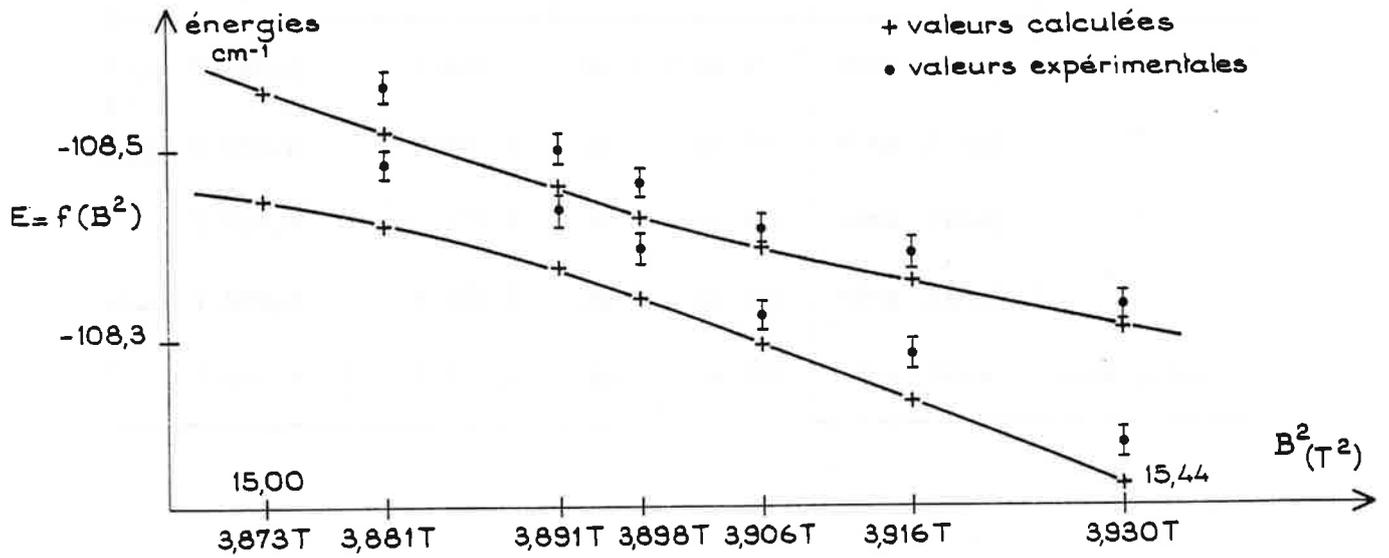
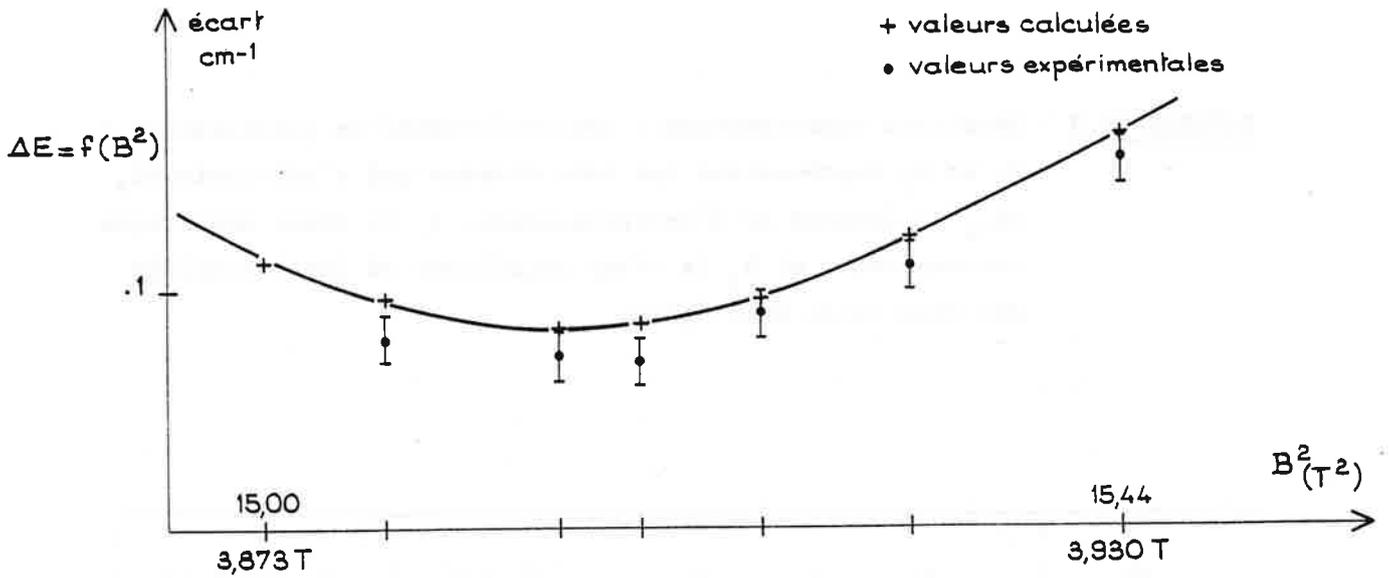


Figure IV-9 : Comparaison théorie-expérience de l'anticroisement $|n=30, K=1\rangle$ avec $|n=31, K=8\rangle$ en polarisation α .

TABLEAU IV.3 : Résultats expérimentaux : anticroisements en polarisation σ
 φ_1 et φ_2 représentent les deux niveaux qui s'anticroisent,
 ΔE_{12} la largeur de l'anticroisement, B_1 le champ magnétique
correspondant et B_2 le champ magnétique où les intensités
des deux raies sont égales

φ_1	φ_2	ΔE_{12}	B_1 (ΔE_{MIN})	B_2 ($\frac{f_1}{f_2} = 1$)
$ n=30, K=1\rangle$	$ n=31, K=8\rangle$	$70 \text{ mK} \pm 7 \text{ mK}$	3,898 T	3,881 T
"	$ n=31, K=7\rangle$	$97 \text{ mK} \pm 7 \text{ mK}$	4,188 T	4,199 T
"	$ n=31, K=6\rangle$	$120 \text{ mK} \pm 7 \text{ mK}$	4,591 T	4,610 T
"	$ n=31, K=5\rangle$	$156 \text{ mK} \pm 7 \text{ mK}$	5,186 T	5,222 T
$ n=31, K=1\rangle$	$ n=32, K=6\rangle$	$100 \text{ mK} \pm 7 \text{ mK}$	4,153 T	4,168 T

Nous pouvons maintenant chercher un modèle expliquant la largeur des anticroisements et surtout leur évolution en fonction du paramètre K' caractéristique du niveau $\psi_2 = |n=31, K'\rangle$. On observe expérimentalement une décroissance de $E_{12}(K')$ lorsque K' croît.

Dans le cadre d'un modèle hydrogénoïde [19, 69], la largeur de l'anticroisement est corrélée à la différence des pentes (E fonction de B^2) des niveaux considérés. Celles-ci traduisent en effet, par l'intermédiaire de $\langle \rho^2 \rangle_K$, la localisation de la fonction d'onde. Les états de K faibles possèdent une forte excitation en ρ , alors que les états de K élevés sont plutôt localisés le long de l'axe du champ magnétique (excitation en z).

Si le terme diamagnétique dépend surtout des éléments de matrice diagonaux de ρ^2 , les caractéristiques de l'anticroisement dépendent essentiellement des éléments de matrice non diagonaux de ρ^2 . Plus la localisation de ces états est différente, plus le recouvrement spatial est faible et donc la largeur de l'anticroisement faible aussi. Une telle évolution irait bien dans le sens de nos résultats expérimentaux.

Une étude de la largeur a été réalisée théoriquement par des calculs de diagonalisations pour deux types d'anticroisements [7], [19, 69]

- $|n, K=1\rangle$ avec $|n+1, K_{MAX}\rangle$
- $|n, K=1\rangle$ avec $|n+1, K_{MOY}\rangle$

Ceci pour des valeurs de n allant de 5 à 16. K_{MAX} désigne le niveau le plus bas du multiplet et K_{MOY} un niveau situé au centre du multiplet.

Elle a montré que la largeur varie comme $e^{-\alpha n}$ où le coefficient α dépend de la valeur de K , et il est plus faible pour K_{MOY} que pour K_{MAX} .

Si on extrapole une telle dépendance pour $n = 30$, on trouve une largeur négligeable devant la largeur naturelle des niveaux. On peut alors considérer que pour le système hydrogénoïde on a des croisements de niveaux.

Les largeurs d'anticroisements que nous observons ne peuvent donc être interprétées par un modèle hydrogénoïde et il est nécessaire de tenir compte du caractère non hydrogénoïde de l'atome de lithium.

Des calculs ont été menés [19, 69], en diagonalisant l'hamiltonien sur un espace $M = 0$, $\Pi_t = +1$ et en introduisant un défaut quantique variable

sur le niveau S ($P=0$). La largeur des anticroisements est alors beaucoup plus importante, elle varie linéairement en fonction de δ_s et sa dépendance en n suit une loi en n^{-4} pour une valeur δ_s fixée. Ces résultats ont été obtenus pour des niveaux de $n = 10$ à 45 et seulement pour les anticroisements $|n, K=1\rangle$ avec $|n+1, K_{MAX}\rangle$.

Dans notre cas, c'est le défaut quantique de l'état P $\delta_p = 0,053$ qui intervient, dans un espace de parité totale $\Pi_t = -1$ et notre étude porte sur les niveaux $n = 30, 31$. Nous pouvons cependant calculer un ordre de grandeur en adoptant les données ($\delta_s = 0,053$). On trouve $\Delta E_{12} \approx 60$ mK qui est bien l'ordre de grandeur de ce que nous observons.

La présence d'états non hydrogénoïdes semble donc responsable en quasi totalité de la largeur des anticroisements. Cependant, ces résultats obtenus par diagonalisation ne permettent pas d'apporter une interprétation physique à ces différentes lois observées. Aussi avons-nous cherché à développer un modèle perturbatif incluant le potentiel du coeur. Ce modèle est analogue à celui de la référence [71] qui traite des anticroisements des niveaux Stark des alcalins.

L'Hamiltonien de l'atome de lithium en présence de champ magnétique s'écrit :

$$H = H_o + V_C + V_D \quad (8)$$

où $H_o = \frac{\vec{p}^2}{2} - \frac{1}{r}$

V_C est le potentiel à symétrie sphérique lié à la présence des électrons des couches complètes du coeur (ici $1s^2$)

$V_D = \frac{1}{8} \gamma^2 \rho^2$ est l'énergie diamagnétique.

On peut choisir comme modèle pour décrire le potentiel de coeur la forme

$$(9) \quad V_C = \sum_{\ell} v_{\ell}(r) P_{\ell} \quad \text{où } P_{\ell} \text{ est le projecteur sur le sous-espace}$$

de fonctions de nombre quantique orbital ℓ fixé.

En champ magnétique nul, on peut imposer au potentiel V_C de donner l'énergie exacte du niveau de Rydberg dans une théorie de perturbation au premier ordre :

$$\begin{aligned}
 E_n^{\text{coeur}} &= -\frac{1}{2n^2} + \langle n, \ell, M | v_\ell(r) | n\ell, M \rangle \\
 &\equiv -\frac{1}{2n^2} - \frac{\bar{\delta}_\ell}{n^3}
 \end{aligned}
 \tag{10}$$

où $\bar{\delta}_\ell = \delta_\ell$ modulo 1 et $-0,5 < \bar{\delta}_\ell \leq +0,5$. Dans le cas du lithium $\bar{\delta}_\ell = \delta_\ell$. Pour les états que nous étudions, ℓ impairs, on peut prendre $\delta_p = 0,053$ et $\delta_{\ell \text{ impair}} = 0$ pour $\ell \geq 3$. Il en résulte que le potentiel de coeur peut être réduit à :

$$V_C = v_p(r) P_p \tag{11}$$

En présence d'un champ magnétique suffisamment fort le terme diamagnétique domine le potentiel du coeur aussi nous pouvons traiter ce dernier en perturbation, par rapport à l'Hamiltonien $H_0 + V_D$ de l'atome d'hydrogène en champ magnétique.

Puisque l'on considère que les niveaux ψ_1 et ψ_2 se croisent pour l'hydrogène, la largeur de l'anticroisement est essentiellement déterminée par le potentiel de coeur, elle est donnée par :

$$\Delta E_{12} = 2 |\langle \psi_1 | V_C | \psi_2 \rangle| \tag{12}$$

La diagonalisation de l'Hamiltonien $H_0 + H_B$ donne :

$$\begin{aligned}
 \psi_1(B) &= \sum_{n, \ell \text{ imp}} a_{n\ell}(B) |n, \ell, M\rangle \\
 \psi_2(B) &= \sum_{n, \ell \text{ imp}} b_{n', \ell'}(B) |n', \ell', M\rangle
 \end{aligned}$$

Nous sommes dans l'espace $M = 1$, $\Pi_z = +1$, la sommation sur n prend en compte le mélange des états de n différents. La diagonalisation dépend de l'intensité du champ magnétique et donc les coefficients $a_{n\ell}$ et $b_{n\ell}$ en dépendent aussi.

$$\begin{aligned}
 \Delta E_{12} &= 2 |\langle \psi_1 | V_C | \psi_2 \rangle| = 2 \left| \sum_{n, \ell} \sum_{n', \ell'} a_{n\ell} b_{n', \ell'} \langle n, \ell, M | V_C | n', \ell', M \rangle \right| \\
 &= 2 \left| \sum_n \sum_{n'} a_{np} b_{n', p} \langle n, P | v_p(r) | n', P \rangle \right|
 \end{aligned}$$

Afin de calculer ΔE_{12} , il nous faut donc évaluer les éléments non diagonaux $\langle n, P | v_p(r) | n', P \rangle$ ainsi que la répartition de la partie P dans les fonctions d'onde ψ_1 et ψ_2 du modèle hydrogénéoïde pour la valeur du champ magnétique considéré, cette répartition étant déduite d'un calcul de diagonalisation.

Pour évaluer le terme $\langle n, P | v_p(r) | n', P \rangle$ on peut dire que l'intégration est limitée dans un domaine de r faible ($r \geq r_{\text{coeur}} \implies v_p(r)=0$), la dépendance en r de la fonction $|n, \ell\rangle$ est pour r petit $A(n)r^\ell$, soit pour l'état P ($\ell=1$), $A(n)r$ ($A(n)$ est un facteur de normalisation qui en première approximation varie comme $n^{-3/2}$ [4])

$$\begin{aligned} \langle n, P | v_p(r) | n', P \rangle &= \int_{r < r_{\text{coeur}}} A(n) r v_p(r) A(n') r \times r^2 dr \\ &= A(n) A(n') \int_{r \leq r_{\text{coeur}}} r^4 v_p(r) dr \end{aligned}$$

On sait que pour $n = n'$

$$\begin{aligned} \langle n, P | v_p(r) | n, P \rangle &= A^2(n) \int_{r \leq r_{\text{coeur}}} r^4 v_p(r) dr \\ &\equiv -\frac{\delta_p}{n^3} \end{aligned}$$

Il en résulte que :

$$\langle n, P | v_p(r) | n', P \rangle = -\frac{1}{(nn')^{3/2}} \delta_p \quad (13)$$

En ce qui concerne les coefficients a_{np} et $b_{n'p}$, ils ne peuvent être déterminés que par la diagonalisation de l'Hamiltonien hydrogénéoïde pour la valeur de B correspondant à l'anticroisement étudié. Ces calculs sont possibles, mais pour des raisons de simplicité nous avons fait une approximation supplémentaire.

Elle consiste à remplacer $\langle \psi_1(B) | V_C | \psi_2(B) \rangle$ par $\langle \psi_1(0) | V_C | \psi_2(0) \rangle$. Pour $r \leq r_{\text{coeur}}$, $\frac{\gamma_p^2}{8} \ll \frac{1}{r}$ par conséquent dans ce domaine $|\psi_1(B)\rangle$ est solution de la même équation différentielle que la fonction non perturbée $|\psi_1(0)\rangle$. Si B est suffisamment faible pour ne pas trop modifier la norme de la fonction d'onde, le remplacement est justifié et l'on peut écrire :

$$|\psi_1(0)\rangle = |n, K\rangle = \sum_{\substack{\ell \\ \text{impair}}} a_{n\ell}^K |n, \ell, M\rangle$$

$$|\psi_2(0)\rangle = |n', K'\rangle = \sum_{\substack{\ell' \\ \text{impair}}} b_{n'\ell'}^{K'} |n', \ell', M\rangle$$

la sommation étant limitée à une seule valeur de n (ℓ mixing),

$$\begin{aligned} \text{et } \Delta E_{12} &= 2 \langle \psi_1(0) | V_C | \psi_2(0) \rangle \\ &= 2 |a_{np}^K| |b_{n',p}^{K'}| \langle n, P | v_p(r) | n', P \rangle \end{aligned}$$

Numériquement pour les anticroisements du niveau $|n=30, K=1\rangle$ avec les composantes du multiplet $n = 31, K'$ variable

$$\Delta E_{12}(K') = 2 |a_{n=30,P}^{K=1}| |b_{n=31,P}^{K'}| \times \frac{\delta_P}{(30 \times 31)^{3/2}}$$

soit exprimé en mK

$$\Delta E_{12}(K') = 820 \times |a_{n=30,P}^{K=1}| |b_{n=31,P}^{K'}| \quad (14)$$

La décroissance de $\Delta E_{12}(K)$ avec le nombre K' s'explique simplement par celle de la partie P de l'état $|n=31, K'\rangle$ c'est-à-dire $b_{n=31,P}^{K'}$.

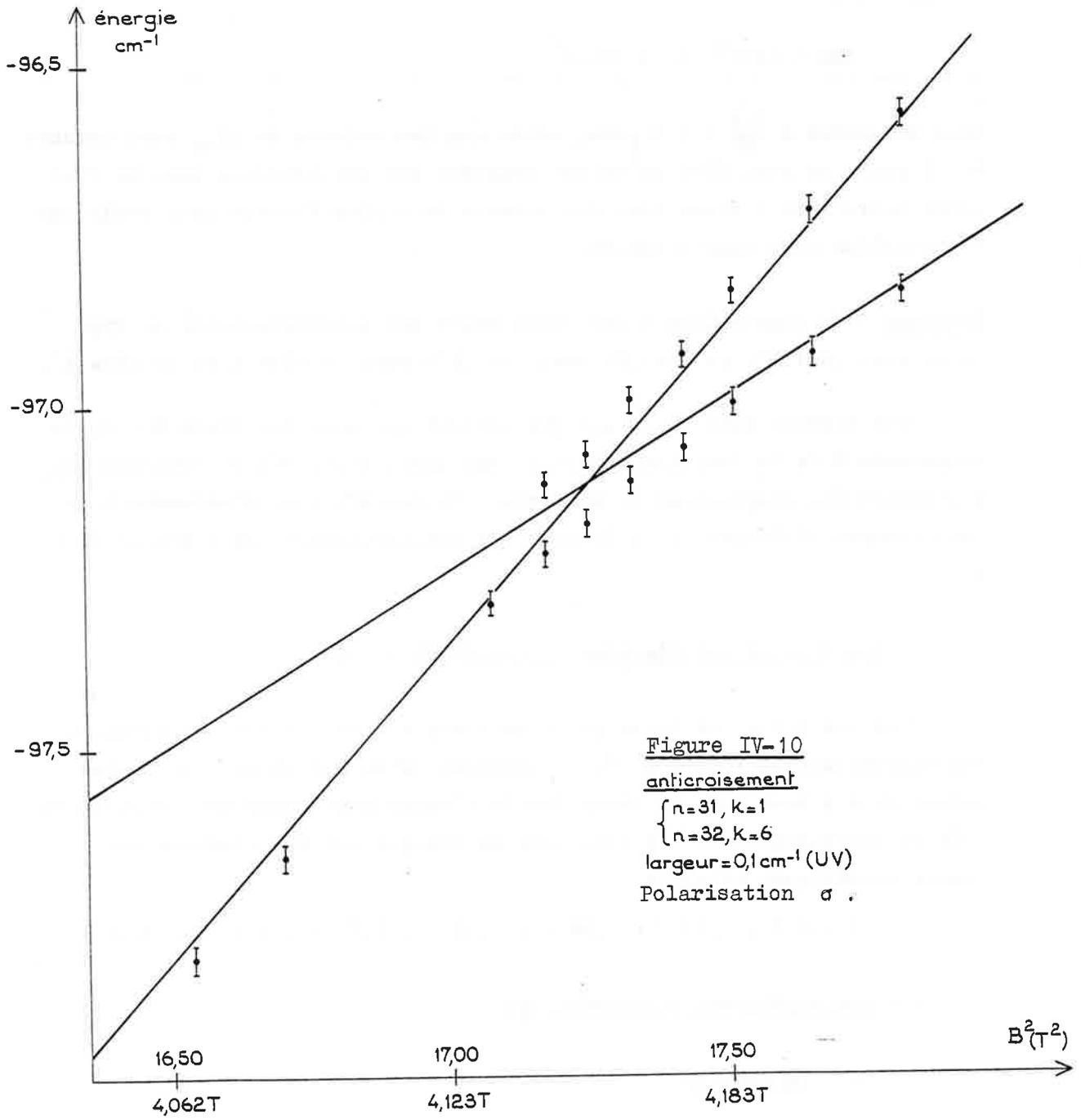
Nous avons reporté dans le tableau IV.4 la largeur expérimentale et la largeur théorique calculée à partir de la formule (14) de tous les anticroisements étudiés. L'accord est très bon pour les deux premiers. Il est moins bon pour le troisième et le quatrième anticroisement.

En fait pour le troisième anticroisement, l'étude par diagonalisation montre qu'un autre niveau $|n=32, K=13\rangle$ associé à une transition d'intensité très faible interagit avec les deux autres dans la zone de l'anticroisement. Ceci peut expliquer le désaccord. Notre résolution expérimentale ne nous a pas permis de mettre en évidence un comportement particulier pour cet anticroisement.

Dans le but d'étudier l'évolution de la largeur cette fois-ci en fonction de n , nous avons aussi étudié l'anticroisement du niveau $|n=31, K=1\rangle$ avec le niveau $|n=32, K=6\rangle$ (Fig. IV.10) et nous l'avons comparé avec l'anticroisement entre les niveaux $|n=30, K=1\rangle$ et $|n=32, K=6\rangle$.

TABLEAU IV.4 : Interprétation de la largeur des anticroisements par un modèle faisant intervenir le potentiel de coeur

ψ_1	a_{nP}	ψ_2	$b_{n=31,P}$	ΔE_{12} (th)	ΔE_{12} (exp)
$ n=30, K=1\rangle$	-0,650	$ n'=31, K=8\rangle$	-0,141	75 mK	70 mK \pm 7
$ n=30, K=1\rangle$	-0,650	$ n'=31, K=7\rangle$	0,167	89 mK	96 mK \pm 7
$ n=30, K=1\rangle$	-0,650	$ n'=31, K=6\rangle$	0,197	105 mK	120 mK \pm 7
$ n=30, K=1\rangle$	-0,650	$ n'=31, K=5\rangle$	0,231	123 mK	156 mK \pm 7
$ n=31, K=1\rangle$	0,636	$ n'=32, K=6\rangle$	0,197	94 mK	100 mK \pm 7



Dans le tableau IV.4 figure la largeur expérimentale et la largeur théorique calculée par notre modèle. Sur les valeurs expérimentales la loi en n^{-4} de la référence [19] donne

$$120 \times (30)^4 = 9,7 \cdot 10^7$$

à comparer à

$$100 \times (31)^4 = 9,23 \cdot 10^7$$

Soit un accord à $\frac{0,5}{10} \approx 5\%$ près, alors que les valeurs de ΔE_{12} sont connues à 7% près. On peut dire qu'un tel résultat est satisfaisant mais il faudrait poursuivre l'étude pour des valeurs de n plus élevées pour avoir une vérification plus significative.

Remarque : la comparaison a été faite entre les anticroisements du type $|n, K\rangle$ avec $|n+1, K'\rangle$ et $|n+1, K\rangle$ avec $|n+1, K'\rangle$ pour le même K et le même K' .

Nous verrons dans le paragraphe suivant que pour les états $M = 0$, la composante P de la fonction d'onde ψ^i est quasi uniformément répartie sur l'ensemble des composantes du multiplet. On devrait donc s'attendre à un comportement différent de la largeur des anticroisements en fonction de K et K' .

2. Spectres en polarisation π , les états $M = 0$.

Pour ces états, le terme paramagnétique est nul et sur les spectres représentés sur la figure IV-11, n'apparaît qu'un multiplet pour chaque valeur de n ; ceci rend en champ faible l'étude plus aisée que celle effectuée en polarisation σ . Les balayages en énergie ont été réalisés aux champs magnétiques suivants :

$$B = 0 \text{ T} ; 1,37 \text{ T} ; 1,94 \text{ T} ; 2,33 \text{ T} ; 2,72 \text{ T} ; 3,11 \text{ T} ; 3,50 \text{ T}$$

A - Les multiplets diamagnétiques.

α - Description.

Conformément à la théorie, pour un champ magnétique donné faible ($B \approx 1,94 \text{ T}$), il apparaît pour chaque niveau n en champ nul, un multiplet

POLARISATION π

spectre d'absorption de l'iode

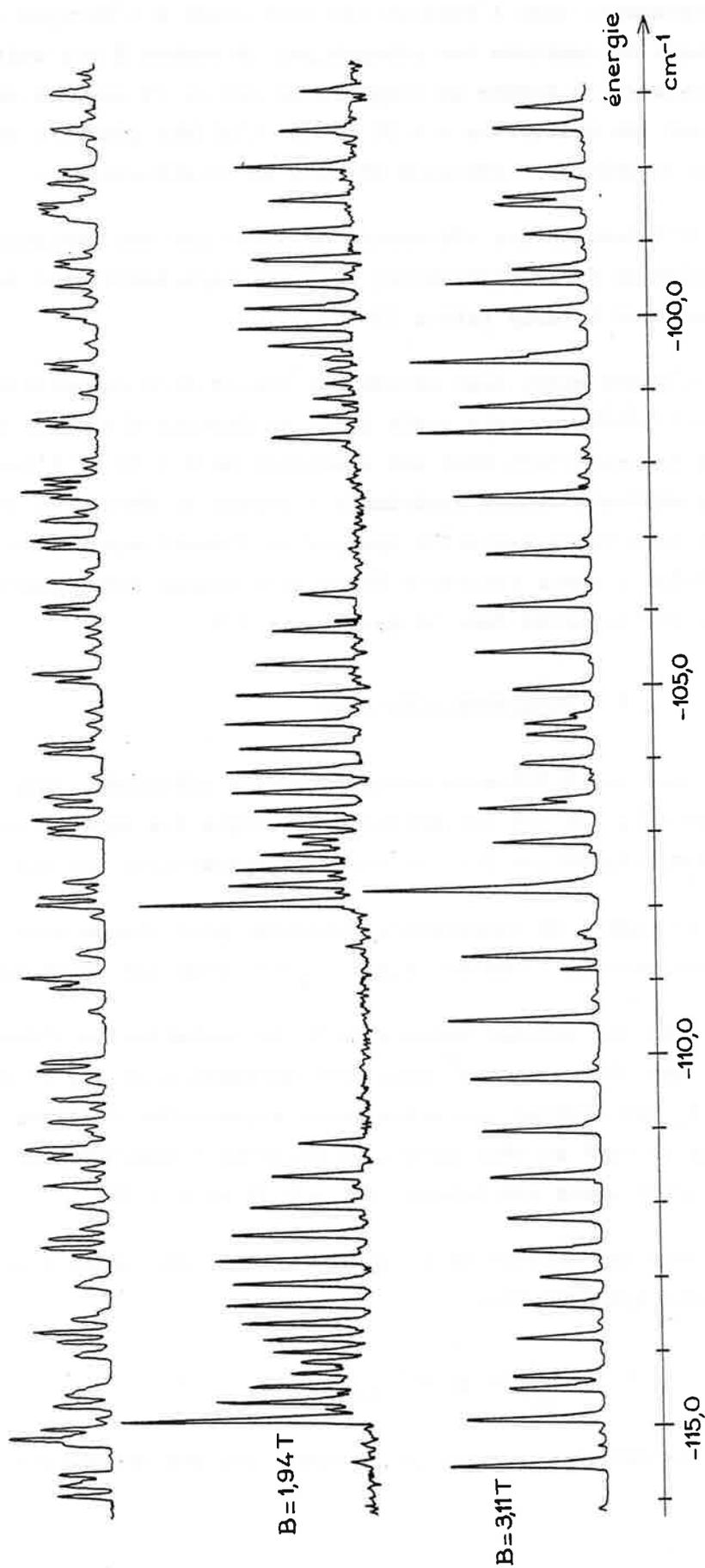


Figure IV-11 : Multiplets diamagnétiques.

de résonances dont l'énergie est supérieure à l'énergie en champ magnétique nul. On numérote les niveaux par le nombre K par ordre d'énergie décroissante. Le nombre de composantes est de 15 pour le multiplet $n = 31$ et 16 pour les multiplets $n = 32$ et 33 . L'allure générale est différente de celle du multiplet analogue observé en polarisation σ .

L'intensité des résonances ne subit pas une variation monotone en fonction de K , en particulier elle est importante pour les états de K élevés surtout à champ faible ($B = 1,37$ T).

L'écart entre deux niveaux de valeur de K successive décroît de $K = 1$ à $K = 11$ environ, puis croît jusqu'au dernier niveau du multiplet. Les niveaux se resserrent donc aux alentours de $K = 11$ où l'intensité est par ailleurs minimale. Notre expérience a permis de mettre en évidence pour la première fois cette variation typique de l'écart entre deux composantes d'un multiplet ; cette variation était déjà connue théoriquement. Nous reviendrons sur ce point dans le paragraphe I.3.

β - Diagramme d'énergie

Avec les différents enregistrements effectués, nous avons tracé un diagramme (Fig. IV.12) représentant l'énergie des niveaux en fonction du carré du champ magnétique (ici le terme paramagnétique est nul).

Le nombre de composantes observées pour chaque multiplet est égal à la dimension de l'espace $\{n, M=0, \Pi_L=-1\}$ tous les états sont donc visibles.

Pour les faibles valeurs de B , la variation de l'énergie d'un niveau $|n, K\rangle$ est linéaire en B^2 mais contrairement à ce qui se pose en polarisation σ , les droites correspondantes extrapolées en champ nu ne convergent pas en un seul et même point. La dispersion observée est faible pour $n = 31$, mais croît assez rapidement pour $n = 32$ et $n = 33$.

Pour ces valeurs de n , nous nous écartons assez sensiblement du modèle purement hydrogénoïde.

$$E = -\frac{1}{2n^2} + \frac{\gamma^2}{8} \langle \rho^2 \rangle_{nK}$$

C'est le défaut quantique de l'état P qui est responsable du phénomène de

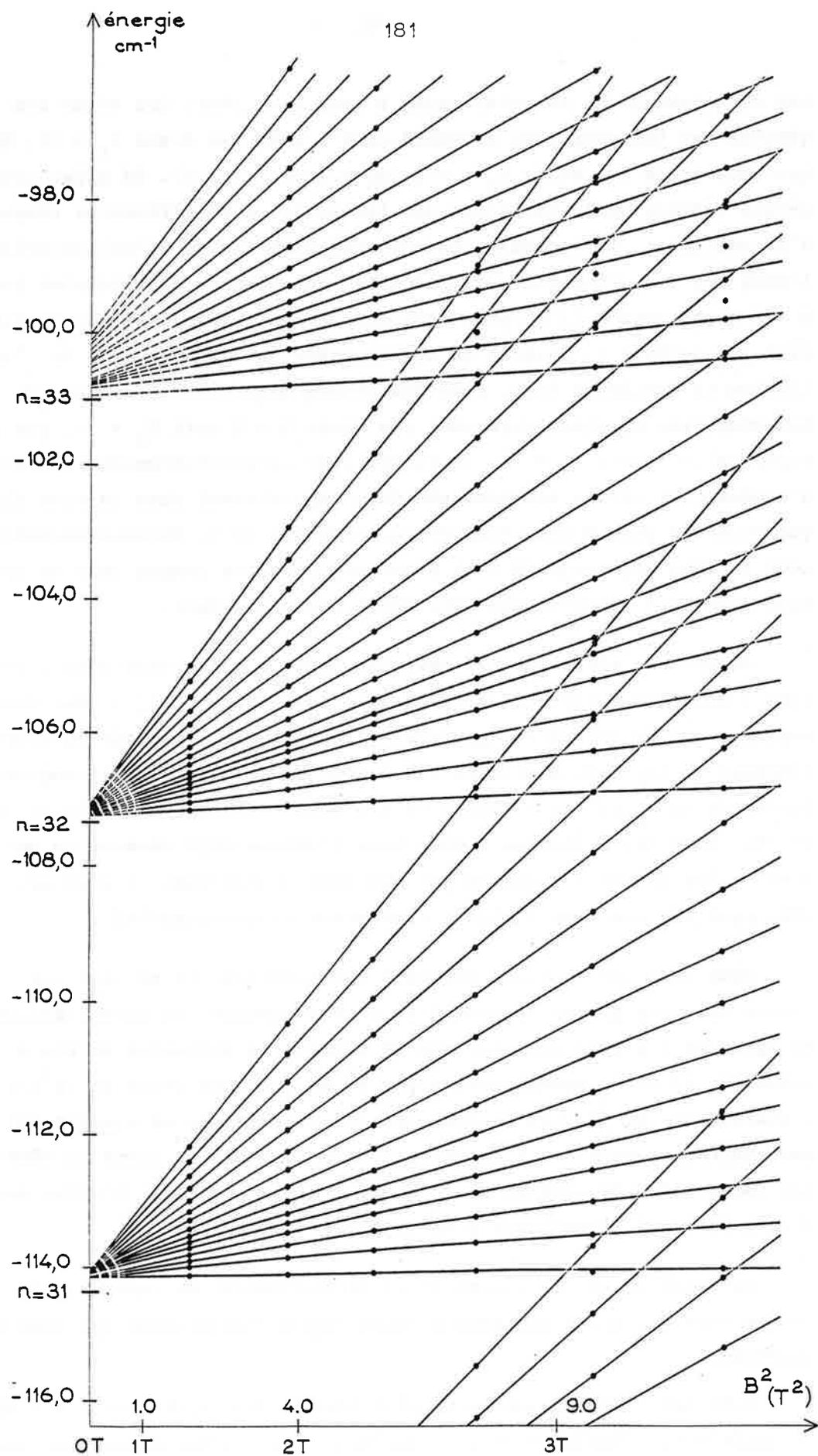


Figure IV-12 : Diagramme des niveaux d'énergie en fonction du carré du champ magnétique en polarisation π ; les points noirs sont les points expérimentaux.

non convergence des énergies quand B tend vers zéro. Cet effet non hydrogénéoïde est beaucoup plus prononcé dans l'état des états $\Pi_z = -1$, $M = 0$ que dans celle des états $\Pi_z = -1$, $|M| = 1$ (§ I.1.A.β). En effet comme le montre l'étude de la variation des intensités des différentes composantes d'un multiplet, le caractère non hydrogénéoïde lié au défaut quantique de l'état $\ell = 1$ se répartit sur toutes les composantes du multiplet lorsque $M = 0$; par contre il n'intervient que sur les composantes de faible valeur de K quand $|M| = 1$. L'effet dû au caractère non hydrogénéoïde de l'atome de lithium se manifeste donc, pour des champs magnétiques faibles, de façon beaucoup plus spectaculaire pour les états $M = 0$ soit $\Pi_z = -1$, que pour les états $|M| = 1$ soit $\Pi_z = +1$. Il serait donc particulièrement intéressant d'étudier les effets non hydrogénéoïdes apparaissant dans la zone diamagnétique pour des champs peu intenses en polarisation π . Malheureusement comme nous l'avons déjà signalé ceci n'est pas possible compte tenu de la résolution spectrale insuffisante dans notre montage actuel.

Malgré cet effet non hydrogénéoïde, nous avons, comme nous l'avons fait dans l'étude en polarisation σ , calculé la pente $\alpha_{n,K}$ (2) des droites représentant la variation quadratique en champ de l'énergie du niveau $|n,K\rangle$ (Tableau IV.5). Nous en tirons une valeur de $\langle \rho^2 \rangle_{nK}$ et nous traçons l'évolution de $\langle \rho^2 \rangle_{nK} / n^4$ en fonction de K/n pour les niveaux $n = 31$ et 32 (Fig. IV.13). Pour les K faibles, comme nous l'avons déjà observé en polarisation σ , les points s'alignent sur une même courbe mais il n'en est plus de même pour les états de K élevés inobservés en polarisation σ .

Même pour une approche purement hydrogénéoïde, il ne faut pas vouloir donner une trop grande universalité à cette courbe. La normalisation par n en abscisse n'a pour seul but que de limiter la variation de K/n à l'intervalle $[0, \frac{1}{2}]$ et la normalisation par n^4 en ordonnée celle de $\langle \rho^2 \rangle / n^4$ à l'intervalle $[0, \frac{5}{2}]$. Les courbes $\langle \rho^2 \rangle / n^4 = f(K/n)$ ne se superposent donc pas exactement pour des n différents mais leur allure reste la même quelles que soient les valeurs de Π_z et M. Elle représentent l'effet du terme diamagnétique à l'intérieur d'un multiplet donné.

On remarque sur la figure IV.13 le changement de concavité de la courbe vers $K = 11$, traduisant le resserrement des niveaux que nous avons observés.

Pour des champs magnétiques plus élevés, $B = 3,11$ T et $B = 3,50$ T, les multiplets s'influencent puis se recouvrent. L'évolution des états que

$$\uparrow \frac{\langle \rho^2 \rangle_{n,k}}{n^4 a_0^2}$$

- + n=31
- n=32

$\frac{\langle \rho^2 \rangle_{n,k}}{n^4 a_0^2}$ en fonction de $\frac{k}{n}$.

Figure IV-13 : Variation de

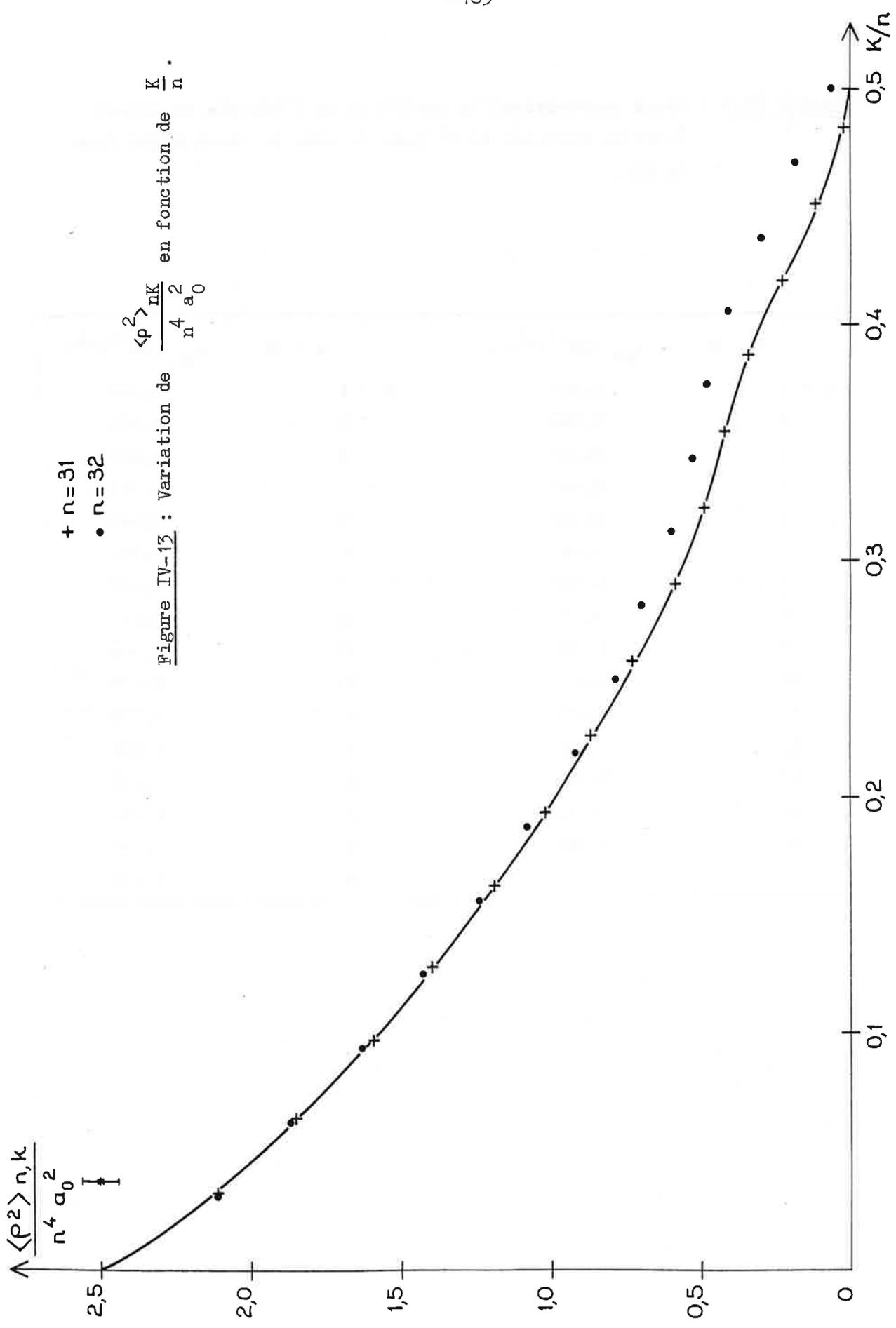


TABLEAU IV.5 : Pente représentant la variation de l'énergie du niveau $|n,K\rangle$ en fonction de B^2 dans la zone de champ magnétique faible.

$n = 31$	$\alpha_{nK} \text{ (cm}^{-1}/\text{T}^2)$	$n = 32$	$\alpha_{nK} \text{ (cm}^{-1}/\text{T}^2)$
K = 1	0,969	K = 1	1,100
2	0,848	2	0,974
3	0,730	3	0,852
4	0,643	4	0,743
5	0,548	5	0,648
6	0,469	6	0,565
7	0,400	7	0,482
8	0,335	8	0,413
9	0,274	9	0,365
10	0,226	10	0,313
11	0,191	11	0,278
12	0,156	12	0,252
13	0,104	13	0,213
14	0,056	14	0,156
15	0,009	15	0,100
		16	0,035

nous continuons à nommer $|n, K\rangle$ se modifie assez peu et nous pouvons sans difficulté identifier les niveaux, en les suivant de façon adiabatique quand B croît.

Alors qu'en polarisation σ , les niveaux de K élevés ne sont pas visibles sur nos spectres et que nous avons pu à des champs élevés $B = 3,89$ T, $4,29$ T et $4,50$ T identifier sans difficulté les raies de K faibles, en polarisation π nous voyons toutes les composantes des multiplets. L'aspect du spectre devient alors très complexe quand l'intensité du champ croît ; de ce fait nous n'avons pu suivre efficacement les niveaux que pour des valeurs du champ magnétique inférieures à $B = 3,50$ T. Pour aller au delà, il faudrait faire des enregistrements avec des pas de champs magnétiques plus faibles, mais même en prenant cette précaution les anticroisements de niveaux viendraient compliquer l'identification des niveaux.

γ - Interprétation théorique

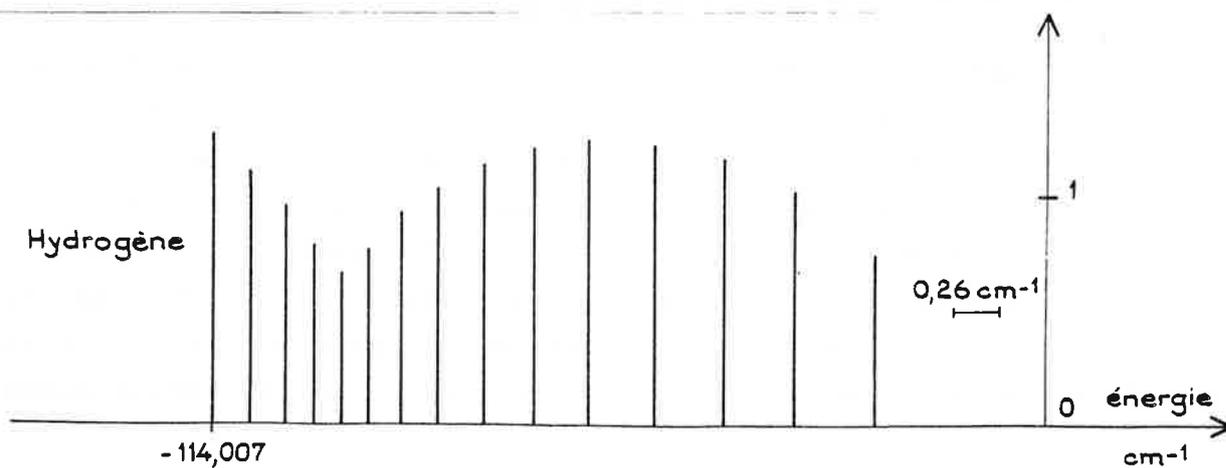
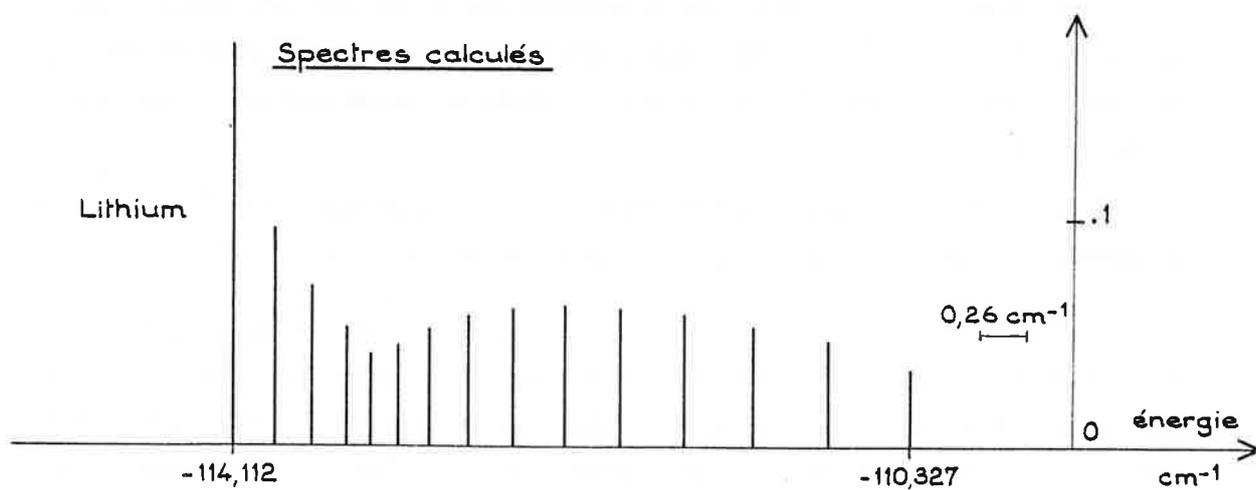
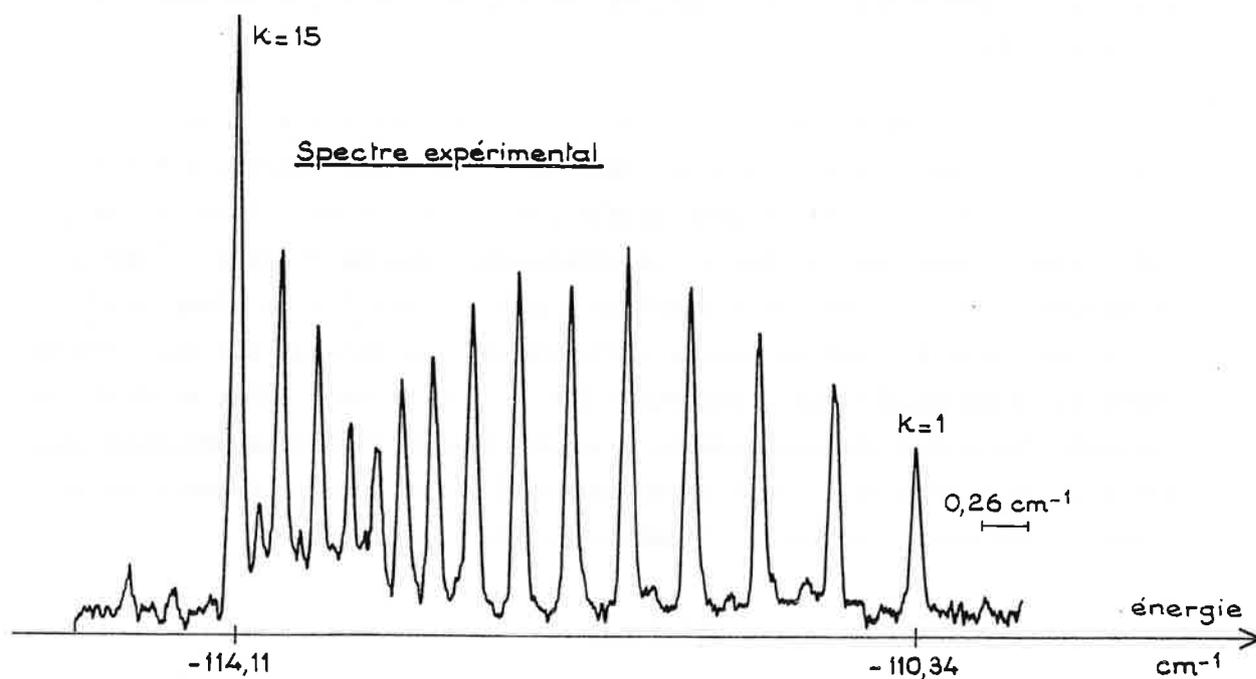
Pour comparer nos résultats expérimentaux à des calculs théoriques, une diagonalisation de l'Hamiltonien analogue à celle effectuée en polarisation σ pour les états $M = +1$ a été réalisée en polarisation π pour les états $M = 0$.

Nous avons plus particulièrement étudié le multiplet $n = 31$ pour l'hydrogène, puis pour le lithium, à un champ magnétique de $1,94$ T.

Sur la figure IV.14, on a comparé le spectre expérimental et les spectres théoriques calculés pour le lithium et l'hydrogène. On peut remarquer que la position des raies calculées dans les deux cas est très peu différente et l'allure générale du multiplet reste la même, en particulier on observe dans tous les cas le resserrement des niveaux aux environs de $K = 11$.

La différence essentielle entre ces spectres réside surtout dans les forces d'oscillateur des transitions associées à des niveaux de différente valeur de K. D'une part ces forces d'oscillateur sont globalement plus importantes pour l'hydrogène que pour le lithium et d'autre part leur répartition sur l'ensemble du multiplet est légèrement différente. Le premier point est lié au caractère non hydrogénoïde très prononcé pour l'état fondamental du lithium ($\delta_s = 0,399$) ; il en résulte que les intégrales radiales de transition dipolaire électrique $\langle 2s | r | np \rangle$ sont dans l'hydrogène environ quatre

Figure IV-14
OBSERVATION DU MULTIPLET $n=31$ EN POLARISATION π
($B=1,94$ T)



fois plus grandes que les intégrales correspondantes calculées dans le lithium. Pour le lithium, l'accord entre théorie et expérience est excellent pour les positions en énergie comme pour l'intensité des raies. Lorsqu'on observe les multiplets $n = 32$ et 33 à $B = 1,94$ T ou le même multiplet $n = 31$ à un champ magnétique plus élevé, l'effet du défaut quantique δ_p est moins visible sur les forces d'oscillateurs, on se rapproche de plus en plus du modèle hydrogénoïde. Qualitativement on peut dire que l'énergie correspondant à la partie non coulombienne de l'Hamiltonien en champ nul devient de plus en plus faible par rapport à l'énergie associée au terme diamagnétique, quand B croît ou quand on étudie des états plus excités. En effet dans ce cas V_C devient négligeable devant V_D (Eq. 8)

B - Les anticroisements

α - Observation

En polarisation π nous avons étudié l'anticroisement $|n=31, K=1\rangle$ avec $|n=32, K=16\rangle$; c'est le premier anticroisement mettant en jeu le niveau $K = 1$ le plus excité du multiplet $n = 31$ et le niveau $K = 16$ le moins excité du multiplet $n = 32$. L'allure générale est différente de celle des anticroisements observés en polarisation en σ . En effet dans le cas présent, les deux raies ont la même intensité avant l'anticroisement.

D'après l'étude développée au § I.2.B.β, l'anticroisement observé en polarisation π correspond au cas $|\langle \varphi_0 | \vec{r} | \varphi_1 \rangle|^2 \approx |\langle \varphi_0 | \vec{r} | \varphi_2 \rangle|^2$ (Eq. Quand l'intensité du champ magnétique croît et se rapproche de la valeur caractéristique de l'anticroisement B_0 , la transition s'effectuant vers le niveau le moins excité $|n=31, K=1\rangle$ transfère son intensité à l'autre transition mettant en jeu le niveau $|n=32, K=16\rangle$. L'intensité de la raie associée au niveau le plus bas diminue et s'annule, celle de l'autre raie devenant beaucoup plus intense. Simultanément l'écart d'énergie entre les deux niveaux diminue. Au delà de l'anticroisement ($B > B_0$) les deux niveaux s'écartent et les deux transitions retrouvent progressivement leurs intensités initiales, pratiquement égales.

La figure IV.15 représente le diagramme (E, B^2) de l'anticroisement, l'évolution de l'écart entre les énergies des deux niveaux. Notre résolution ne nous permet plus de distinguer celles-ci lorsque leur écart est

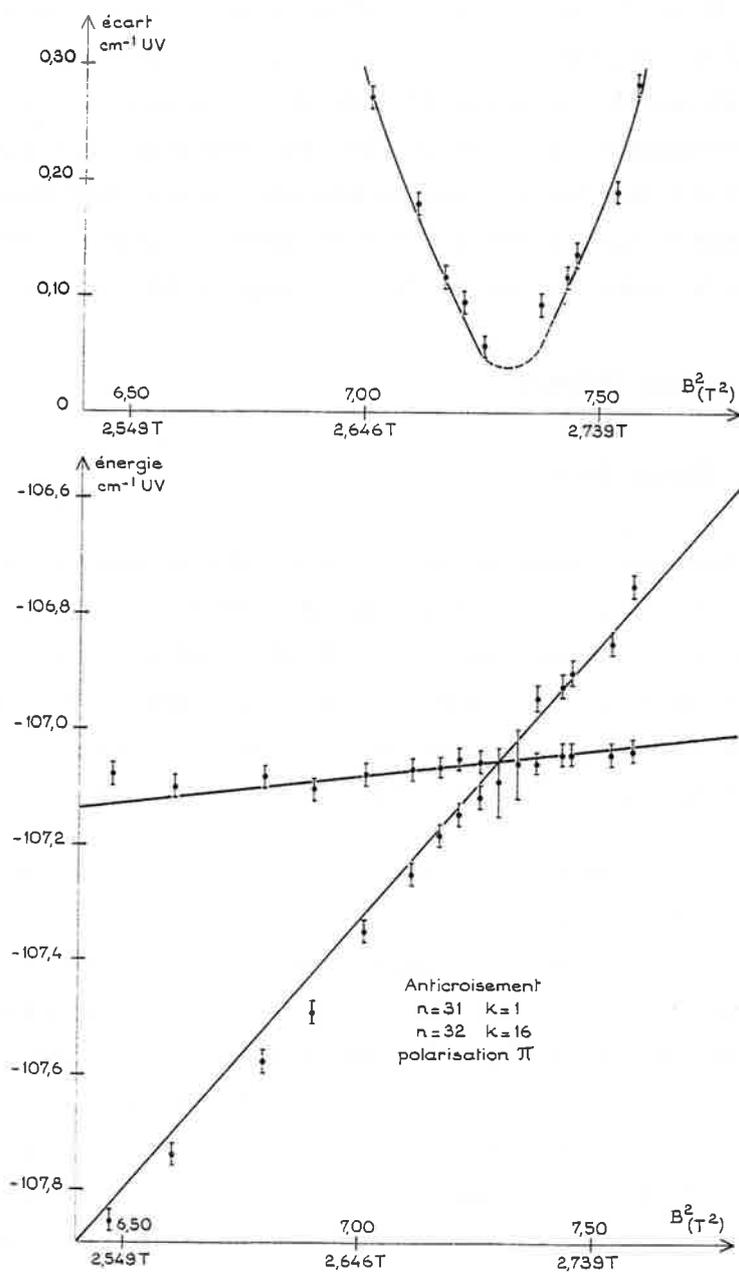


Figure IV-15 : Anticrossement $|n=31, K=1\rangle$ avec $|n=32, K=16\rangle$.
Polarisation π .

inférieur à la demi largeur de la raie la plus intense. Nous ne pouvons donc donner une borne supérieure pour ΔE_{12} , $\Delta E_{12} \leq 30$ mK.

β - Interprétation

Pour cet anticroisement, l'étude théorique utilisant la méthode de diagonalisation n'a pas encore été réalisée, cependant on peut grâce au modèle développé dans le cas des états $M = 1$ (§ I.2.B.β) donner un ordre de grandeur de sa largeur, essentiellement due au potentiel de coeur (Eq.

$$\begin{aligned} \Delta E_{12} &= \frac{2 \times 0,053}{(32 \times 32)^{3/2}} \times |a_{n=31,P}^{K=1}| |b_{n=32,P}^{K=16}| \text{ u.a.} \\ &= 744 \times |a_{n=31,P}^{K=1}| |b_{n=32,P}^{K=16}| \text{ mK} \\ &= 45,2 \text{ mK} \end{aligned}$$

D'autres anticroisements devront être étudiés mais pour cela il semble nécessaire soit de s'intéresser à des multiplets d'énergie plus basse, soit d'utiliser le système laser haute résolution car si notre modèle est correct, les largeurs ne dépasseront guère 50 mK, valeur qui est à la limite de notre résolution actuelle.

3. Structure des multiplets et symétrie approchée en champ faible

Cette symétrie approchée caractéristique de l'effet diamagnétique de l'hydrogène en champ faible a été mise en évidence par des études récentes, nous en avons déjà parlé dans le chapitre II, paragraphe III.C. Elle est décrite par l'invariant adiabatique $\Lambda = 4a^2 - 5a_z^2$ et se manifeste sur nos spectres de deux manières différentes :

- Dans un modèle hydrogénoïde, on peut parler de "croisement" de niveaux tant la largeur prédite est faible. Pour le lithium cette largeur est plus grande mais est essentiellement reliée au caractère non hydrogénoïde des états nP .

- Les positions en énergie des composantes d'un multiplet ont la même distribution caractéristique aussi bien en polarisation π qu'en polarisation σ . On remarque en particulier dans les deux cas un resserrement des

niveaux vers $K = 11$ pour le multiplet $n = 31$. De plus les niveaux de faible valeur de K présentent un écartement bien supérieur à celui observé pour les états de valeur maximale de K .

En polarisation π , les forces d'oscillateurs permettent d'observer toutes les composantes sur le spectre expérimental alors que seules les premières sont visibles en polarisation σ .

L'allure générale du multiplet fait penser à deux oscillateurs, l'un représentant les états de K faibles, l'autre les états de K élevés et qui interagissent vers $K = 11$ où l'on observe un resserrement des niveaux.

Pour visualiser ce phénomène nous avons tracé sur un histogramme (Fig. IV.16) la valeur de l'écart $\Delta E_D(nK) - \Delta E_D(n, K+1)$ entre les termes diamagnétiques pour le multiplet $n = 31$ de l'hydrogène à une valeur du champ magnétique de $B = 1,94$ T.

$$\Delta E_D(n,K) = E_{n,K}(B) - E_n(B=0)$$

Une figure analogue (IV.17) a été tracée en polarisation σ .

On constate deux phases distinctes décrites par deux segments de droites. L'une représente l'évolution pour les états de K faible (1 à 11), l'autre celle pour les états de K élevés (11 à 15).

Une première tentative d'interprétation peut être donnée en terme d'approximation adiabatique : pour les états de K faibles, c'est l'excitation en ρ qui est dominante. Pour une excitation n_ρ fixée (Eq. 54 - ch II) les états de K différents sont caractérisés à une excitation en z différente. Pour les états de K élevés, l'excitation en z est dominante et pour une excitation en z fixée, les états K diffèrent par leur excitation en ρ . L'interférence entre les deux systèmes se produit aux environs de $K = 11$.

Une telle interprétation explique qualitativement le phénomène, mais les excitations en ρ et z sont beaucoup plus corrélées que ne le laisse supposer cette description.

Dans la description classique en termes d'ellipses de Kepler dont les paramètres varient lentement au cours du temps [7, 16, 40] on a mis en évidence deux comportements différents liés au signe de Λ (voir chapitre II) :

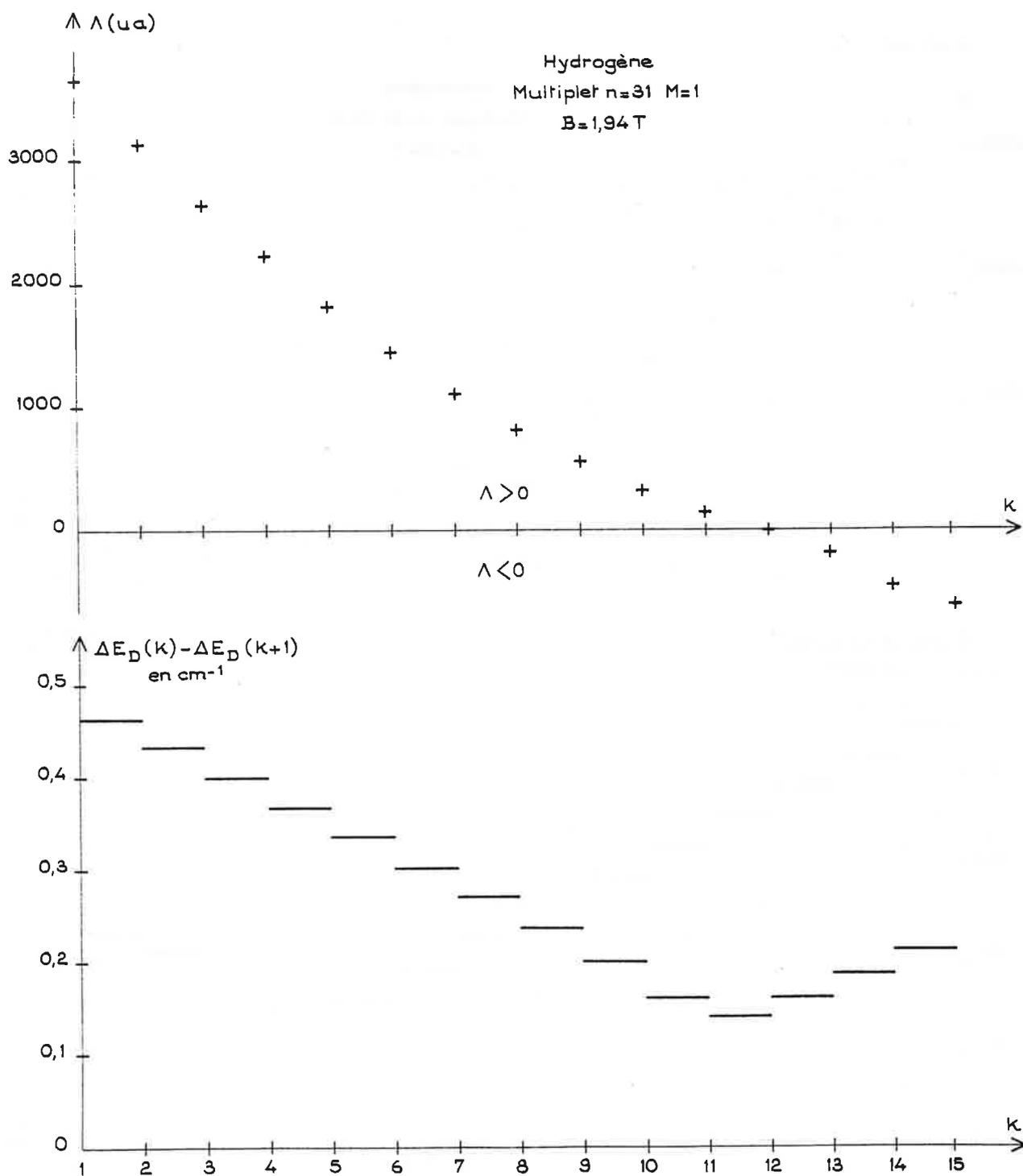


Figure IV-16

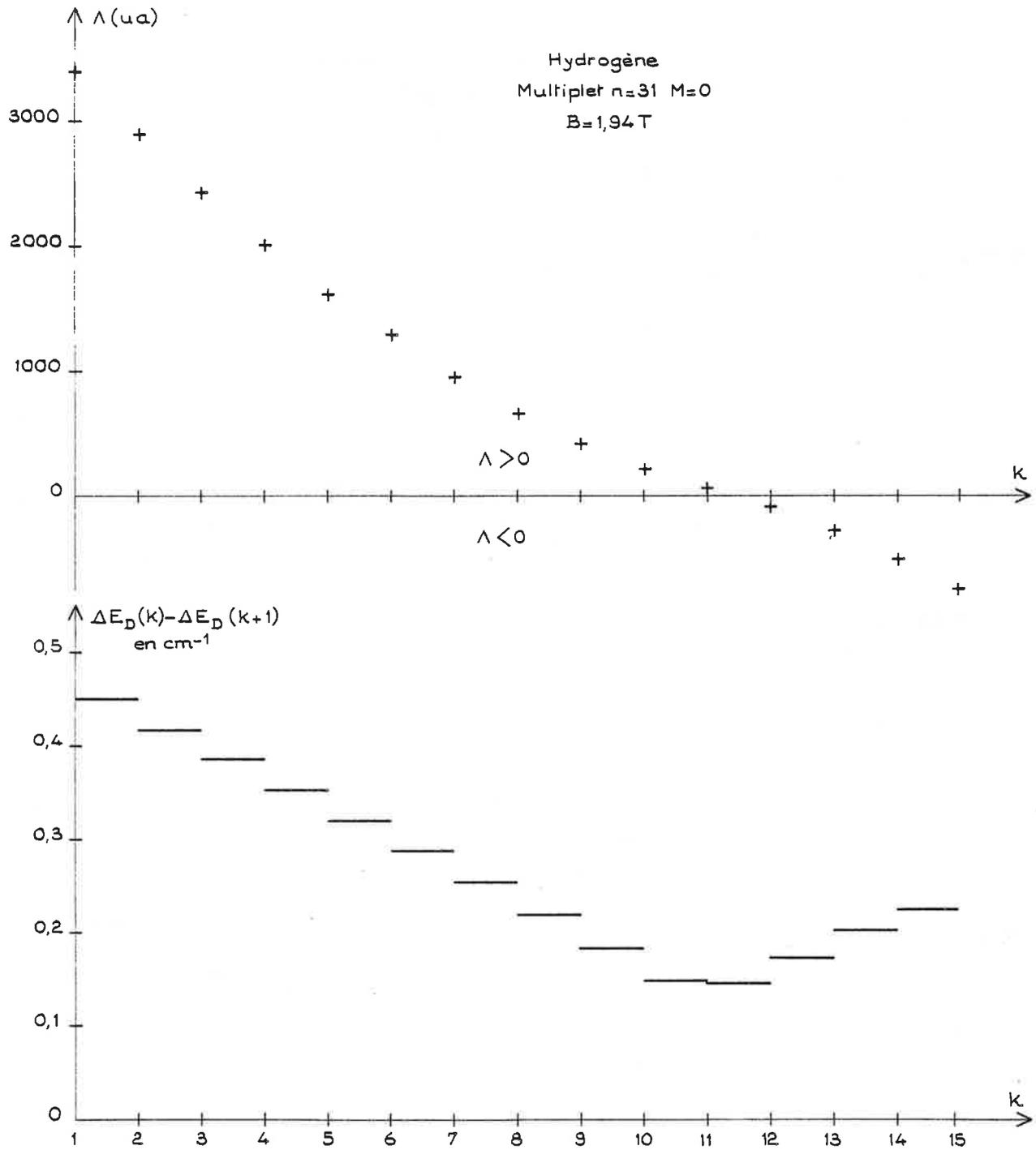


Figure IV-17

- les états dits de rotation où le grand axe de l'ellipse ($\sim \vec{A}$) peut tourner autour de l'axe du champ magnétique. Ces états correspondent aux valeurs faibles de K où $\langle \rho \rangle^2$ est important. $\underline{\Lambda > 0}$.

- les états dits de libration où le grand axe de l'ellipse reste localisé le long de l'axe du champ. Ces états correspondent aux K élevés où ρ est très faible. $\underline{\Lambda < 0}$.

Nous avons donc calculé pour chaque niveau d'énergie la valeur de λ correspondant à la valeur de l'invariant adiabatique Λ qui a pour dimension h^2 : $\Lambda = h^2 \lambda$. Le déplacement diamagnétique d'un niveau s'écrit en unités atomiques (Eq. 46 ch II)

$$\Delta E_D = \frac{\gamma^2}{8} \frac{n^2}{2} (n^2 + M^2 + \lambda) \quad (15)$$

Le résultat est représenté sur les figures IV.16 et IV.17 et on constate que le changement qui s'opère dans l'évolution des niveaux est bien relié au changement de signe de Λ puisque celui-ci s'annule à l'endroit où les deux segments de droites décrits précédemment se coupent.

La variation ΔE_D , donc de λ , à l'intérieur d'un multiplet n fixé est bien connue maintenant. D'un point de vue semiclassique [16, 73, 74] on sait qu'il existe deux types de mouvements quand $\frac{|M|}{n} < 5^{-1/2} \sim 0,447$. Cette condition est bien vérifiée dans nos expériences où $|M| \leq 1$ $n = 30$. Ces deux types de mouvement apparaissent à des énergies différentes, l'énergie de transition étant égale à [16]

$$E_S = \frac{\gamma^2 n^2}{16} (M^2 + n^2)$$

Pour une énergie diamagnétique E_D inférieure à E_S (soit $\Lambda < 0$ et K grand) on observe un mouvement de libration, le mouvement de rotation apparaissant pour $\Delta E_D > E_S$ ($\Lambda > 0$ et K petit). Ces résultats sont en accord avec ceux des références [39] et [40].

Une analyse quantique a été faite tout récemment par les auteurs de la référence [17, 33, 106]. Il s'agit de la description en coordonnées paraboliques de deux oscillateurs en ξ et η couplés par le terme diamagnétique. Cette méthode est fondée sur des arguments de théorie des groupes et permet de calculer ΔE_D par un développement en perturbation, le premier terme

donnant l'équation (15) à un facteur additif +3 dans la parenthèse. Ce facteur est dû au fait que l'équation (15) provient d'un traitement semi classique et que l'autre formule découle d'un traitement purement quantique. C'est un pas important dans la compréhension du diamagnétisme en champ faible.

II - Vers les états de quasi Landau.

Pour observer ces états, nous avons effectué des balayages en énergie pour deux intensités fixées de champ magnétique : $B = 3,89$ T et $4,86$ T. Afin d'identifier plus aisément les niveaux observés, ces enregistrements débutent pour des niveaux n voisins de 32, c'est-à-dire dans la zone diamagnétique où les spectres sont bien connus.

En polarisation π , la répartition presque uniforme de la partie P sur tout les états du multiplet, entraîne une allure très chaotique des spectres observés (tous les niveaux provenant des différents états $|n, K\rangle$ sont excités).

C'est pourquoi nous nous sommes surtout intéressés aux spectres en polarisation σ . Dans ce cas dans la zone diamagnétique la partie P est surtout localisée sur les états de faible valeur de K . Cette caractéristique se conserve pour des états d'énergie plus élevée et l'on peut aussi identifier les raies les plus intenses et leur attribuer des nombres quantiques net K . Ces nombres ne sont pas des nombres quantiques exacts dans la zone de quasi Landau considérée mais on peut suivre les états de fonction adiabatique en fonction du champ magnétique à partir d'une zone où la notation $|n, K\rangle$ est correcte. Pour cette raison nous avons conservé cette notation.

Nous avons choisi de décrire séparément les spectres à $B = 3,89$ T et $B = 4,86$ T car ils révèlent des comportements assez différents.

1. B = 3,89 T.

A - Méthodes expérimentales.

Rappelons que pour les spectres dans la zone diamagnétique nous laissons les états s'ioniser dans le champ électrique créé par la haute tension à laquelle est porté le détecteur. Nous avons pu conserver cette méthode jusqu'à des énergies situées à moins de 30 cm^{-1} au-dessous de la limite d'ionisation et observer ainsi les niveaux jusqu'à $n = 41$.

Pour des énergies plus élevées les signaux enregistrés deviennent trop faibles et nous avons utilisé une autre méthode de détection. Une impulsion de champ électrique est appliquée environ 200 ns après le pulse laser. Si l'intensité du champ électrique est suffisante, les états s'ionisent. Utilisant cette méthode de détection par ionisation par champ, nous avons pu observer les niveaux $n = 42, 43, 44$.

B - Résultats.

Sur le tableau IV.5 nous avons répertorié tous les niveaux observés, leur énergie (corrigées du terme paramagnétique) comptée à partir de la limite d'ionisation.

Sur la figure IV.18 nous avons tracé l'énergie du niveau en fonction de n , pour les états $K = 1$ et 2 . L'écart d'énergie entre deux niveaux consécutifs peut être évalué en unités $\hbar\omega_c$. A $B = 3,891 \text{ T}$, $\hbar\omega_c$ correspond à $3,677 \text{ cm}^{-1}$; nous avons reporté la valeur des écarts sur le tableau.

C - Interprétation.

L'énergie du niveau que l'on appelle $|n, K\rangle$ s'écrit à un champ magnétique B fixé :

$$E = \langle \psi_{nK}(B) | \frac{\vec{p}^2}{2n} - \frac{1}{r} + \frac{\gamma^2}{8} \rho^2 | \psi_{nK}(B) \rangle$$

où $\psi_{nK}(B)$ désigne la fonction d'onde du niveau $|n, K\rangle$ à B donné.

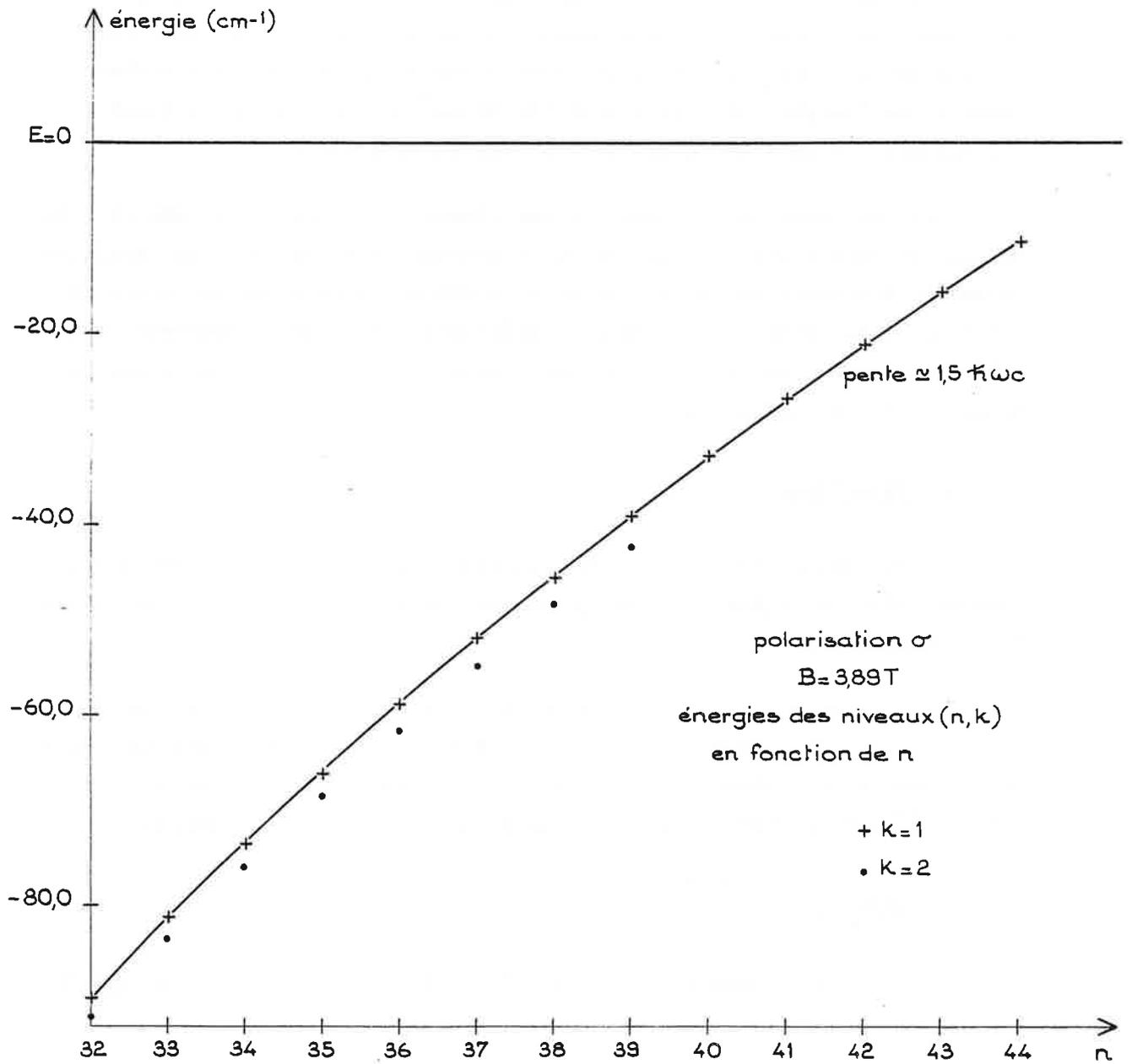


Figure IV-18 : Niveaux de quasi Landau.

Séries K=1 et K=2 .

Dans l'approximation hydrogénoïde, dans la zone diamagnétique, pour les faibles valeurs de champs où les multiplets interagissent peu, la fonction d'onde ψ_{nK} dépend très peu de B et l'on peut écrire en posant $H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{r}$ et en unités atomiques

$$\begin{aligned} E &= \langle \psi_{nK} | H_0 | \psi_{nK} \rangle + \frac{\gamma^2}{8} \langle \psi_{nK}(0) | \rho^2 | \psi_{nK}(0) \rangle \\ &= -\frac{1}{2n^2} + \frac{\gamma^2}{8} \langle \rho^2 \rangle_{nK} \quad (\text{calculé pour } B = 0) \end{aligned}$$

On trouve alors la variation quadratique en B^2 de l'énergie du niveau.

Toujours dans la zone diamagnétique, mais à des champs plus élevés, lorsque les multiplets se mélangent, la fonction d'onde dépend de B, ce qui influe à la fois sur $\langle \psi_{nK}(B) | H_0 | \psi_{nK}(B) \rangle$ et sur $\frac{\gamma^2}{8} \langle \psi_{nK}(B) | \rho^2 | \psi_{nK}(B) \rangle$.

Au premier ordre de la théorie des perturbations, la perturbation diamagnétique introduit dans les fonctions d'onde un terme correctif proportionnel à B^2

$$\psi_{nK}(B) = \psi_{nK}(0) + \Delta_2 \psi_{nK}(B)$$

Le développement de l'énergie jusqu'aux termes en B^2 inclus s'écrit alors :

$$E \approx \langle \psi_{nK}(0) | H_0 | \psi_{nK}(0) \rangle + 2 \langle \psi_{nK}(0) | H_0 | \Delta_2 \psi_{nK}(B) \rangle + \frac{\gamma^2}{8} \langle \psi_{nK}(0) | \rho^2 | \psi_{nK}(0) \rangle$$

Les corrections sur les fonctions d'onde se ressentiront surtout sur l'élément de matrice de H_0 .

La correction $\Delta_2 \psi_{nK}(B)$ a pour expression :

$$\begin{aligned} \Delta_2 \psi_{nK}(B) &= \sum_{\substack{(n',K') \\ \neq (n,K)}} \frac{1}{-\frac{1}{2n^2} + \frac{1}{2n'^2}} \langle \psi_{n',K'}(0) | \frac{\gamma^2 \rho^2}{8} | \psi_{nK}(0) \rangle | \psi_{n',K'}(0) \rangle \\ &= \sum_{n',K'} \alpha_{n',K'}(B^2) | \psi_{n',K'}(0) \rangle \end{aligned}$$

On peut donc écrire :

$$\langle \psi_{nK}(B) | H_0 | \psi_{nK}(B) \rangle = \sum_{n'} -\frac{1}{2n'^2} \sum_{K'} \left[\alpha_{n',K'}(B^2) \right]^2 = -\frac{1}{2n^2} - \alpha(B^2)$$

n	Energie pour K = 1 (cm ⁻¹)	Ecart en unités $\hbar\omega_c$	Energie pour K = 2 (cm ⁻¹)	Ecart en unités $\hbar\omega_c$		
32	- 90,10	}	- 91,96	}		
33	- 81,70		2,28		- 83,74	2,23
34	- 73,78		2,15		- 76,01	2,10
35	- 66,20		2,06		- 68,64	2,00
36	- 59 10		1,93		- 61 64	1,90
37	- 52,14		1,89		- 54,94	1,82
38	- 45,52		1,80		- 48,53	1,74
39	- 39,04		1,76		- 42,42	1,66
40	- 32,92		1,66			
41	- 26,86		1,64			
42	- 21,20		1,54			
43	- 15,52		1,54			
44	- 10,16		1,46			

TABLEAU IV.5

Si les contributions des états $\psi_{n',K'}(0)$ tels que $n' < n$ sont prédominantes, le terme $\alpha(B^2)$ sera positif ; par contre si la contribution des états $\psi_{n',K'}(0)$ avec $n' > n$ l'emporte, $\alpha(B^2)$ sera négatif.

Dans le diagramme d'énergie expérimental (E, B^2) l'énergie d'un niveau $|n, K\rangle$ croît moins vite que ne le laisse prévoir la loi en B^2 . Dans la mesure où un calcul à l'ordre B^2 est justifié, la courbure observée dans le diagramme (E, B^2) est donc une conséquence de l'abaissement de la valeur moyenne de H_0 dans l'état $|n, K\rangle$: $\alpha(B^2)$ est alors positif

$$E \approx -\frac{1}{2n^2} - \alpha(B^2) + \frac{\gamma^2}{8} \langle \rho^2 \rangle_{nK}(B=0)$$

Lorsque l'on passe progressivement de la zone diamagnétique à la zone de quasi Landau, la fonction d'onde dépend de plus en plus de B . La correction diamagnétique modifie simultanément les valeurs de $\langle H_0 \rangle$ et de $\langle \rho^2 \rangle$. Dans ce cas, un calcul par perturbation au premier ordre perd toute sa signification.

En particulier au voisinage de la limite d'ionisation en champ nul, énergie diamagnétique et énergie coulombienne sont du même ordre de grandeur. Cet effet se traduit par une décroissance de l'écart d'énergie entre deux niveaux $K = 1$ successifs, $|n, K=1\rangle$ et $|n+1, K=1\rangle$, cet écart tendant vers la valeur $\frac{3}{2}\hbar\omega_c$ pour E voisin de zéro.

Pour des niveaux jusqu'à $n = 39$, les états $K = 2$ sont facilement identifiables, voire même jusqu'à $n = 37$ pour les niveaux $K = 3$. D'après le tableau IV.5 on peut constater que l'écart en énergie de deux niveaux successifs $K = 2$ suit une loi analogue à celle observée pour deux niveaux successifs $K = 1$. En effet les écarts entre les niveaux $|n, K=1\rangle$ et $|n+1, K=1\rangle$ sont approximativement égaux aux écarts entre les niveaux $|n-1, K=2\rangle$ et $|n, K=2\rangle$.

Dans le chapitre II nous avons vu au paragraphe III.2.A que l'approximation adiabatique consistant à étudier le mouvement à deux dimensions dans le plan $z = 0$ permet d'interpréter les positions des structures les plus intenses observées pour les états $\Pi_z = +1$. Ce modèle est par conséquent parfaitement adapté pour étudier les structures les plus intenses apparaissant dans nos spectres pour une polarisation σ de la lumière excitatrice ($\Pi_t = 1$, $|M| = 1$, $\Pi_z = +1$) et associées aux états $K = 1$. En effet ces états $K = 1$ sont essentiellement localisés dans le plan $z = 0$ [7].

Cependant, comme le montre la figure de la référence [67], même dans ce cas, elle ne peut donner la valeur exacte de la position en énergie des niveaux.

De plus comme nous l'avons déjà signalé au chapitre II (§ III.2.A) l'étude du mouvement dans le seul plan $z = 0$ ne permet absolument pas d'interpréter l'existence de résonances supplémentaires que nous avons associées aux états $K \geq 2$ en utilisant le procédé adiabatique pour identifier les niveaux. Il semble évident que cette méthode bidimensionnelle ne peut être que qualitative, et est incapable d'interpréter l'évolution des niveaux de K plus élevés. Le problème reste fondamentalement tridimensionnel et nous devons nécessairement tenir compte du mouvement dans la direction Oz pour parvenir à une description plus élaborée. Cette description a déjà fait l'objet du paragraphe III.3 du chapitre II et est décrite dans la référence [90].

La résolution de l'équation de Schrödinger bidimensionnelle dans le plan $z = \text{Cte}$ est associée à la valeur propre $\varepsilon_{n_\rho}(z)$ (chapitre II, § III.3, Eq. 54). Le nombre quantique n_ρ est égal au nombre de noeuds de la fonction $\varphi_{n_\rho}(\rho, z)$ dans l'intervalle $]0, +\infty[$. Les potentiels adiabatiques $\varepsilon_{n_\rho}(z)$ permettant de décrire le mouvement dans la direction Oz sont associés à la même valeur du nombre quantique n_ρ quelle que soit la valeur de z considérée, et sont des fonctions de z symétriques.

$$\text{Pour } |z| \rightarrow +\infty \quad \varepsilon_{n_\rho}(z) \rightarrow \gamma(n_\rho + \frac{1 + |M|}{2}) - \frac{1}{z}$$

le potentiel converge vers le $n_\rho^{\text{ème}}$ état de Landau.

Pour $|z| \rightarrow 0$, $\varepsilon_{n_\rho}(z)$ tend vers la valeur propre du modèle de quasi-Landau. Dans le cas d'une interaction diamagnétique faible, le développement à l'ordre γ^2 de l'énergie conduit à la valeur propre $\varepsilon_{n_\rho}(z)$ [24]

$$\varepsilon_{n_\rho}(z) = - \frac{1}{2(n_\rho + |M| + \frac{1}{2})^2} + \frac{5}{16} \gamma^2 \left(n_\rho + |M| + \frac{1}{2} \right)^4$$

Dans ce cas n_ρ et n peuvent être reliés par $n = n_\rho + \ell + 1$ où $|M| \equiv \ell$ (cf. chapitre II, § III.2.A).

Dans la mesure où l'approximation adiabatique est valable, les états sont caractérisés par les deux nombres quantiques n_ρ et v , v étant égal au nombre de noeuds de la fonction $\chi_{n_\rho, v}(z)$ dans l'intervalle $]0, +\infty[$. Pour

$\Pi_z = +1$ l'état adiabatique le plus profond correspond à $v = 0$; la probabilité de présence de cet état est maximale en $z = 0$ et s'étend sur un domaine en z étroit. Pour $\Pi_z = -1$ l'état adiabatique le plus profond correspond à $v = 1$. Bien sûr l'approximation adiabatique n'est valable que si l'écart entre deux valeurs propres successives $\epsilon_{n_\rho}(z=0)$ et $\epsilon_{n_\rho+1}(z=0)$ est grand devant l'écart entre les deux niveaux $(n_\rho, v=0)$ et $(n_\rho, v=2)$. Ces deux types d'écart sont caractéristiques des fréquences des mouvements en ρ et z respectivement.

Dans l'approximation adiabatique, où mouvements en z et en ρ sont totalement découplés, l'énergie des états correspondant au même nombre quantique n_ρ croît lorsque v croît. Par conséquent il est impossible d'identifier les états (n_ρ, v_0) et (n_ρ, v_0+2) aux états $|n, K=1\rangle$ et $|n, K=2\rangle$ (ici $v_0 = 0$ si $\Pi_z = 1$ et $v_0 = 1$ si $\Pi_z = -1$). Il faut remarquer qu'à notre connaissance il n'existe actuellement aucune relation permettant de corréler les deux jeux de nombres quantiques (n, K) et (n_ρ, v) relation qui soit valable dans tout le domaine du plan (E, B^2) .

Ce problème reste toujours ouvert et est étroitement connecté d'une part à la conservation des surfaces nodales pour un état de nombres quantiques donnés lorsque B croît, d'autre part à la validité d'un modèle utilisant une approximation adiabatique.

On peut cependant remarquer qu'au voisinage de la limite d'ionisation en champ nul, pour des états de nombre quantique n_ρ élevé, les courbes de potentiel adiabatique ont pour expression pour $|z|$ suffisamment faible

$$\epsilon_{n_\rho}(z) = \epsilon_{n_\rho}(0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \epsilon_{n_\rho}(z) \Big|_{z=0} z^2 + \dots$$

Pour deux valeurs successives de n_ρ , les potentiels harmoniques sont peu différents ($\frac{\partial^2}{\partial z^2} \epsilon_{n_\rho}(z) \Big|_{z=0}$ varie peu avec n_ρ). Les deux séries d'états

adiabatiques n_ρ et $n_\rho+1$ présentent donc des résonances identiques d'énergie

$$E_{n_\rho/\nu} \approx \epsilon_{n_\rho}(0) + \bar{\omega}_z \left(\nu + \frac{1}{2} \right)$$

Par conséquent les sous-structures apparaissant dans l'approximation de quasi-Landau sont formées de séries différentes de résonances (associées chacune à une valeur de ν), les différentes résonances d'une série étant distantes de $\epsilon_{n_\rho+1}(0) - \epsilon_{n_\rho}(0)$. Ceci permet de comprendre les sous-structures observées à haute résolution dans les modulations de quasi-Landau [39, 40].

Dans notre expérience, nous avons identifié les états avec les nombres quantiques n et K et nous avons aussi observé que les écarts d'énergie entre deux niveaux successifs d'une série donnée (K fixé $K = 1$ et 2) suivent la même loi de variation en fonction de n .

Dans le paragraphe suivant nous avons simplement cherché à montrer l'évolution du rapport entre les termes coulombien et diamagnétique pour les états $K = 1$. Pour ces états un modèle très simple bien adapté consiste à s'intéresser au potentiel $V(\rho, z=0)$.

En ne tenant pas compte du terme d'énergie centrifuge, les états propres d'énergie $E_{n,K=1}$ sont solutions de l'équation de Schrödinger correspondant au mouvement dans le potentiel à une dimension $V(\rho) = -\frac{1}{\rho} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{8}$. Connaissant pour un champ B fixé, l'énergie expérimentale $E_{n,K=1}$, le point tournant ρ^* correspondant à l'extension maximale dans un mouvement classique est solution de l'équation

$$V(\rho^*) = E_{n,K=1}$$

Pour l'état considéré, l'énergie d'interaction coulombienne $\langle -\frac{1}{\rho} \rangle$ est en module minorée par $\frac{1}{\rho^*}$. L'énergie d'interaction diamagnétique $\langle \frac{\gamma^2 \rho^2}{8} \rangle$ est majorée par $\frac{\gamma^2 \rho^{*2}}{8}$. Le rapport Q entre l'énergie diamagnétique et le module de l'énergie coulombienne est donc majoré par :

$$Q = \langle \frac{\gamma^2 \rho^2}{8} \rangle / \langle 1/\rho \rangle < \frac{\gamma^2}{8} \rho^{*3}$$

Le tableau IV.6 contient les énergies expérimentales des états $E_{n,K} = 1$ observés en polarisation σ , la position en unités atomiques du point tournant ρ^* et la valeur maximale Q_{\max} du rapport Q .

Etats K = l	E (cm ⁻¹)	ρ^* (ua)	Q _{Max}
n = 32	- 90,11	1880	0,22
n = 33	- 81,71	1977	0,26
n = 34	- 73,78	2070	0,30
n = 35	- 66,20	2164	0,35
n = 36	- 59,10	2255	0,39
n = 37	- 52,15	2346	0,44
n = 38	- 45,52	2436	0,49
n = 39	- 39,04	2525	0,55
n = 40	- 32,92	2610	0,60
n = 41	- 26,86	2695	0,67
n = 42	- 21,20	2776	0,73
n = 43	- 15,53	28,56	0,79
n = 44	- 10,15	29,34	0,86

TABLEAU IV.6

Le tableau IV.6 donne les résultats obtenus. On s'aperçoit que lorsque n croît on passe régulièrement d'un état $n = 32$ où l'on peut encore traiter par perturbation le terme diamagnétique ($Q_{\max} = 0,22$) à un état $n = 44$ voisin de la limite d'ionisation où terme diamagnétique et terme coulombien ont même importance ($Q_{\max} = 0,86$).

2. $B = 4,86$ T.

Les méthodes expérimentales sont les mêmes : impulsion de champ électrique appliqué environ 200 ns après l'impulsion laser.

Le spectre de la figure IV.19 est construit à partir de plusieurs enregistrements. On observe bien sûr toujours les deux types d'état $M = -1$ et $M = +1$ séparés de l'énergie paramagnétique $\hbar\omega_c$ mais à la place de résonances assez étroites observées pour $B = 3,89$ T, figurent des structures constituées de plusieurs résonances. Nous en avons observé cinq et les écarts entre deux structures consécutives suivent la dépendance habituelle obtenue pour les niveaux de quasi-Landau. Ils tendent vers $\frac{3}{2}\hbar\omega_c$ à $E = 0$, nous avons d'ailleurs pu observer une de ces structures au delà de la limite d'ionisation en champ nul, le dernier écart mesuré étant de $1,4 \hbar\omega_c$.

L'existence de ces structures n'est pas encore interprétée. S'agit-il vraiment de structures d'un état de quasi-Landau, ou bien est-ce une coïncidence de résonances ? On peut émettre l'hypothèse simple suivante : nous avons vu que les états $K = 1$, $K = 2$, $K = 3$ suivaient le même type de loi dans la zone des états de quasi-Landau, l'écart entre deux niveaux consécutifs tendant vers $\frac{3}{2}\hbar\omega_c$ à la limite d'ionisation en champ nul. Il est possible qu'à la valeur de $4,86$ T, la série $K = 1$ et la série $K = 3$ entrent en coïncidence, l'énergie du niveau $|n, K=1\rangle$ étant très voisine de celle du niveau $|n+1, K=3\rangle$. Ces niveaux nous l'avons vu interagissent pour l'atome de lithium. Il est possible qu'un tel processus soit responsable du phénomène observé.

Dans le cas présent toute approximation adiabatique cesse d'être valable ; une étude théorique précise est nécessairement très complexe car il faut tenir compte explicitement des couplages entre états $|n, K\rangle$, $|n', K'\rangle$ ou bien ceux notés $|n_p, v\rangle$, $|n'_p, v'\rangle$ selon la méthode utilisée.

III - Seuils de photoionisation.

Dans ce paragraphe sont reportés des résultats chronologiquement antérieurs aux études des multiplets diamagnétiques. Nous dirons ensuite quelques mots sur des études toutes récentes et très prometteuses.

Cette étude nous a été dictée par la méthode de détection utilisée. Il est maintenant bien établi, par les études faites sur la photoionisation des atomes en présence d'un champ électrique \vec{F} que l'existence d'un tel champ a pour effet d'abaisser le seuil de photoionisation. En première approximation l'énergie critique d'ionisation E_C est déduite de considérations simples portant sur l'étude de la courbe de potentiel $V(z) = -\frac{1}{|z|} + Fz$:

$$E_C = -2\sqrt{F} \text{ en u.a.}$$

l'unité atomique de champ électrique est $F_0 = \frac{e^2}{|q|a_0^2} = 5,142 \cdot 10^{11} \text{ V/m.}$

En présence d'un champ magnétique \vec{B} de direction Oz parallèle à la direction du champ électrique \vec{F} appliqué, la courbe de potentiel dans la direction \vec{Oz} n'est pas modifiée (par rapport au cas $B = 0$) et on pourrait s'attendre si l'on utilise le même raisonnement classique que E_C soit indépendant de B .

C'est afin de confirmer ou d'infirmer cette hypothèse que nous avons entrepris les expériences suivantes.

1. Expérience en polarisation π .

Dans la zone d'interaction, nous avons appliqué entre les deux plaques un champ électrique continu de valeur fixée mais faible (jusqu'à 6 V/cm). En balayant la fréquence du laser en polarisation π , nous avons repéré à quelle énergie apparaissait le signal de photoionisation : cette énergie est appelée seuil de photoionisation E_C . Nous avons recommencé ces opérations en présence d'un champ magnétique d'intensité B . Là aussi, à partir d'une énergie seuil $E_{C,B}$ donnée apparaît le signal.

Un enregistrement type est représenté sur la figure IV.20 et a été effectué à $B = 1,94 \text{ T}$ avec un champ électrique continu de 6 V/cm.

Figure IV-19 : Spectre à $B = 4,864 \text{ T}$, en polarisation σ . Les raies les plus intenses correspondant aux spectres σ^+ et σ^- sont décalées de $\hbar\omega_c$. Pour les niveaux correspondant aux états $M=1$, on a tracé l'écart entre deux raies successives évoluant vers $\frac{3}{2}\hbar\omega_c$ à $E=0$.

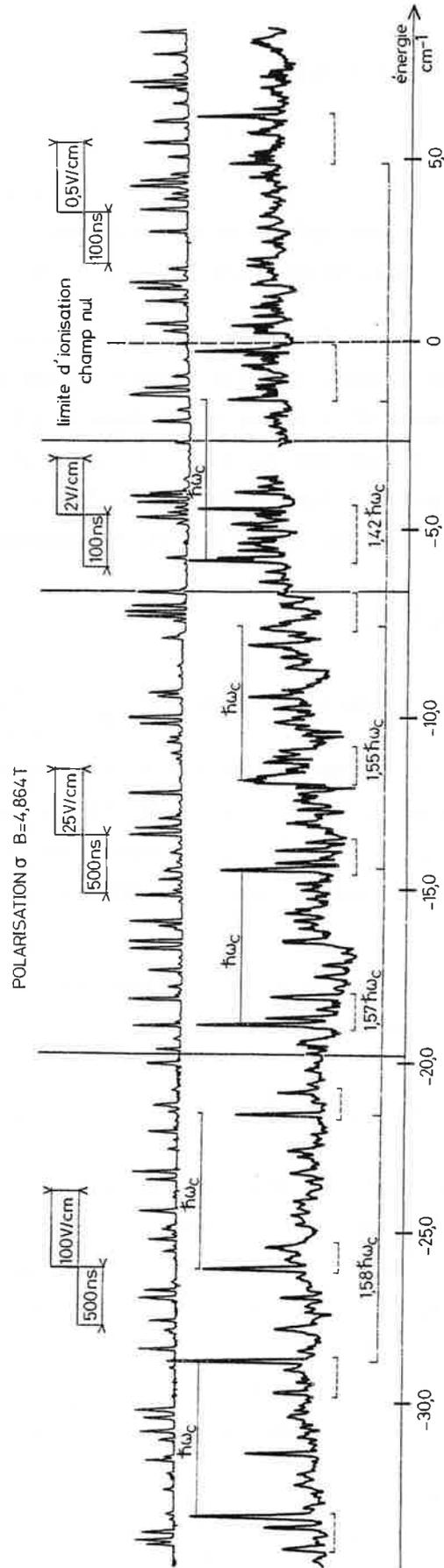
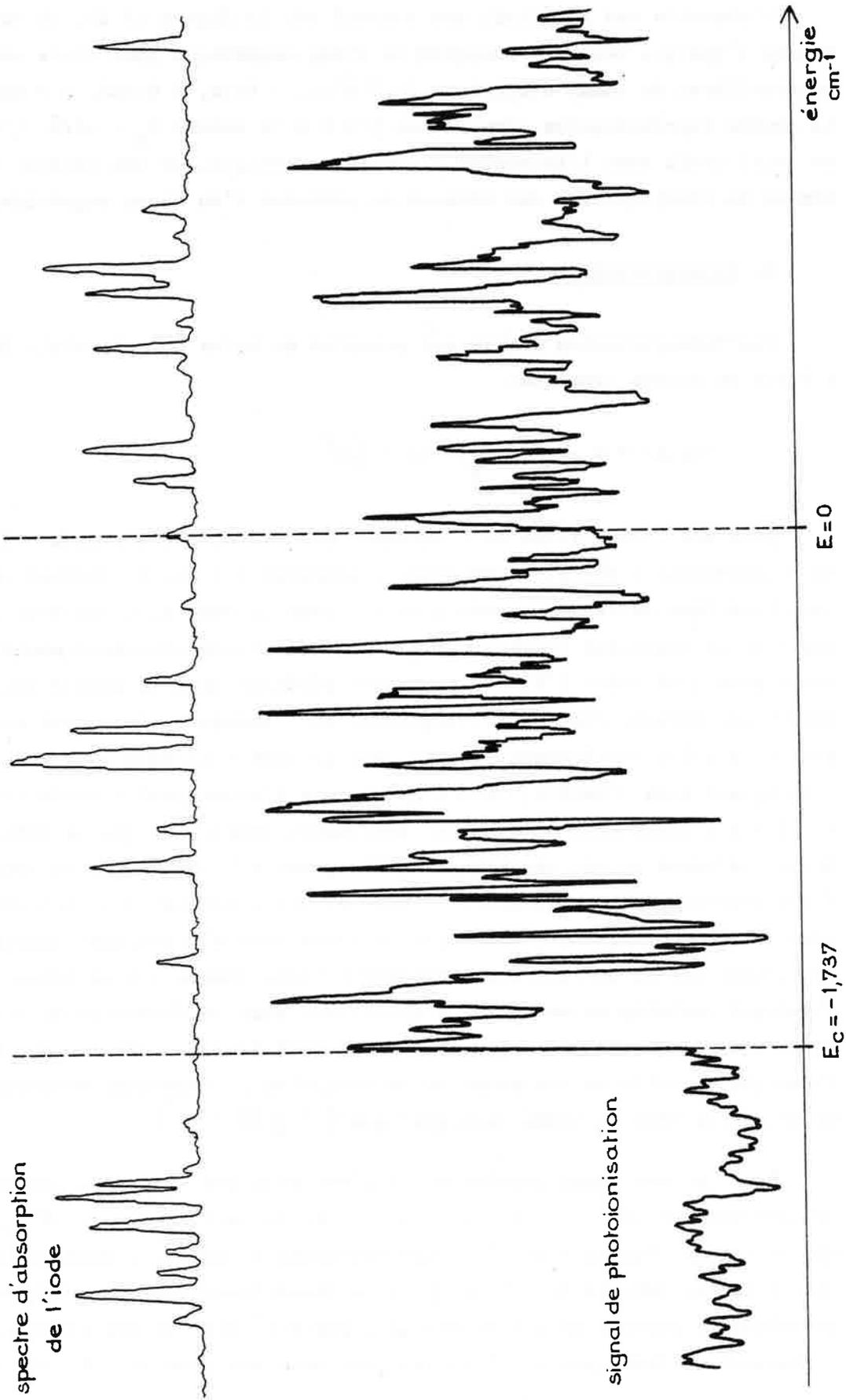


Figure IV-20 : POLARISATION π , SEUIL D'IONISATION
 $B = 1,94 \text{ T}$; $F = 0,5 \text{ V/cm}$



L'ensemble des résultats est reporté sur la figure IV.21, où est tracée l'énergie seuil en fonction du champ magnétique pour trois valeurs particulières du champ électrique (0,5 V/cm, 1 V/cm, 2 V/cm). A F donné, la courbe représentative coupe l'axe $B = 0$ à la valeur $E_C = -2\sqrt{F}$. L'énergie de seuil croît avec l'intensité du champ magnétique, ce qui traduit le phénomène de stabilisation des niveaux en présence d'un champ magnétique.

2. Interprétation.

Une interprétation simple est possible en terme de potentiel. Celui-ci s'écrit en unités atomiques

$$V(\rho, z) = -\frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + Fz + \frac{\gamma^2}{8\rho^2}$$

Pour une valeur fixée de l'énergie totale E de l'électron $E = T + V$, où T représente l'énergie cinétique, l'équation $E = V(\rho, z)$ définit une surface frontière entre deux zones A et B. Dans la zone A, E est plus grand que V et en mécanique classique l'électron se trouve obligatoirement dans cette zone ; en effet l'électron ne peut pénétrer dans la zone B qui correspond à une énergie cinétique T négative. Si classiquement on peut trouver une trajectoire entièrement incluse dans la zone A partant du noyau et s'éloignant vers l'infini, cela signifie que l'atome peut s'ioniser. Pour qu'il y ait ionisation il est donc absolument nécessaire que la zone A contienne le noyau et ait une branche s'éloignant à l'infini. Cette condition n'est cependant pas suffisante. Il peut en effet exister des trajectoires ayant la même énergie E passant par le noyau mais n'atteignant jamais l'infini. Ceci est dû au fait que l'énergie E tient compte non seulement de l'énergie associée au mouvement s'effectuant dans la direction du champ électrique (direction où l'ionisation est possible) mais également de l'énergie associée au mouvement de la direction ρ , mouvement nécessairement borné compte tenu du terme diamagnétique. (Fig IV - 22)

Sans ou avec champ magnétique il n'est possible de tracer une telle trajectoire que si $E > E_C = -2\sqrt{F}$. Si $E \leq E_C$ la surface $E - V(\rho, z) \geq 0$ délimite deux régions A et A', l'une entourant le noyau, l'autre regardant vers l'infini dans la direction du champ électrique. Dans un traitement quantique le passage de l'électron de l'une à l'autre de ces zones peut évidemment se faire par effet tunnel mais avec une probabilité très faible.

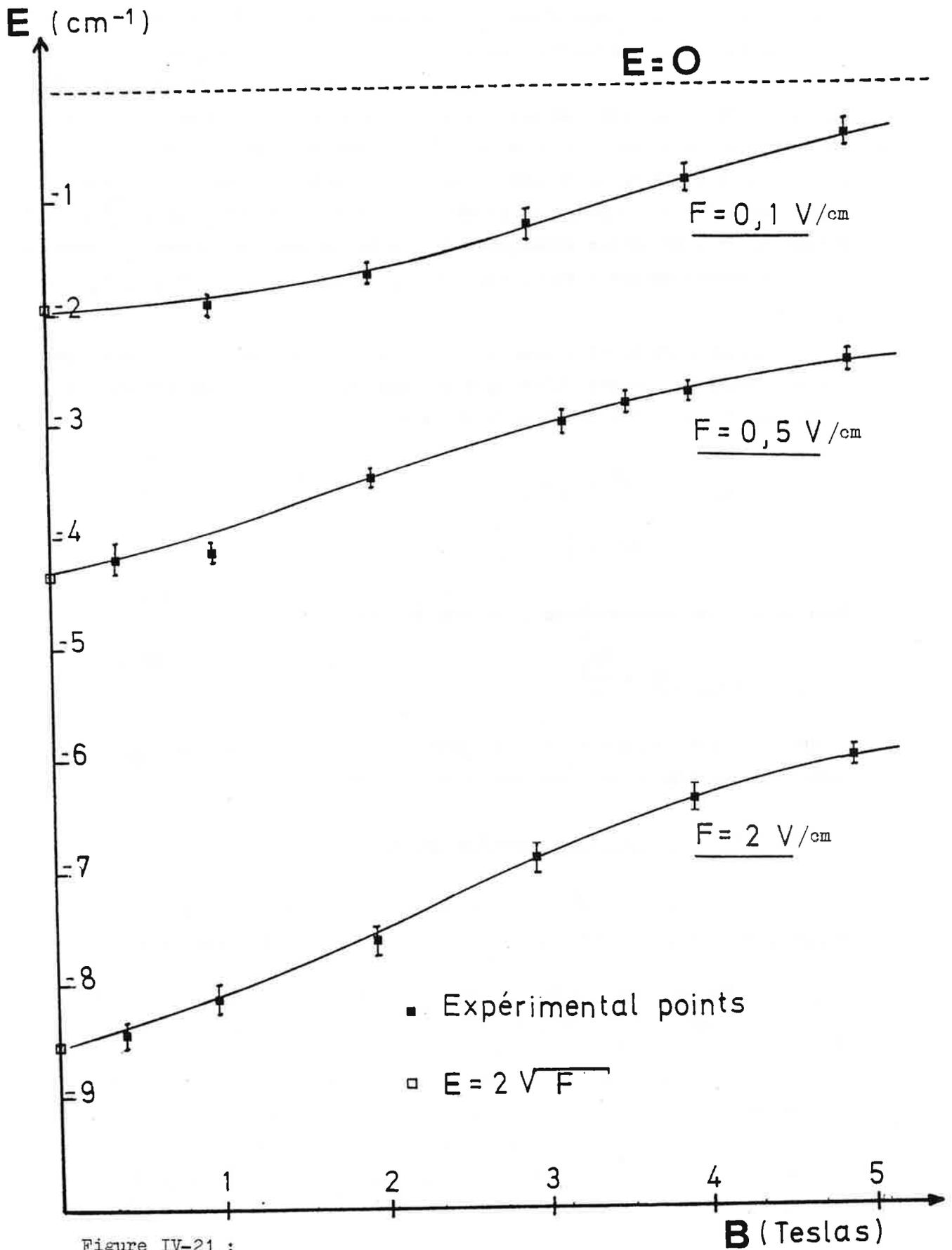


Figure IV-21 :

Evolution du seuil d'ionisation Stark en fonction du champ magnétique pour trois valeurs du champ électrique (0,1 V/cm , 0,5 V/cm , 2 V/cm).

Lorsque $E > -2\sqrt{F}$ les deux zones A et A' communiquent par un col dont l'ouverture en ρ : ρ_0 est d'autant plus grande que $E - E_C$ est plus grand. Au voisinage du col, c'est-à-dire de l'axe Oz, on peut considérer que le mouvement de l'électron est essentiellement dominé par le champ magnétique et une approche adiabatique est possible. Dans ces conditions, pour étudier le mouvement en z, on peut moyenniser l'influence du mouvement en ρ . L'énergie minimale associée au mouvement en ρ en présence du seul terme diamagnétique est égale à l'énergie du premier niveau de Landau E_{L_1} soit $\frac{\hbar\omega_c}{2}$ c'est-à-dire $E_{L_1} = \frac{\gamma}{2}$ en unités atomiques. Ce premier niveau de Landau est associé à une extension maximale en ρ , égale à ρ_C et telle que $E_{L_1} = \frac{\gamma^2}{8\rho_C^2}$ soit $\rho_C^2 = \frac{4}{\gamma}$.

On conçoit alors très bien qu'il est nécessaire que $\rho_0 > \rho_C$ pour que l'atome puisse s'ioniser. L'énergie critique d'ionisation en présence d'un champ magnétique est alors déterminée par

$$\begin{aligned} E_{C,B} &= -2\sqrt{F} + \frac{\gamma^2}{8}(\rho_C)^2 \\ &= -2\sqrt{F} + \frac{\gamma}{2} \end{aligned}$$

Dans le système international, on peut écrire

$$E_{C,B} = E_C + \frac{\hbar\omega_c}{2}$$

ce qui explique la partie la plus importante de l'évolution de E_{CB} en fonction du champ magnétique dans nos observations.

3. Derniers résultats : seuil en polarisation σ .

Pour conclure il a semblé intéressant de décrire un résultat récent qui pose encore à l'heure actuelle des problèmes d'interprétation.

En polarisation σ , le terme paramagnétique rendait difficile une méthode expérimentale semblable à celle utilisée en polarisation π .

Nous avons donc employé une méthode différente : l'excitation a lieu en présence uniquement du champ magnétique ; la longueur d'onde de la lumière excitatrice est choisie de façon à correspondre à une des résonances de quasi-Landau $|nK\rangle$ (σ^+) ou (σ^-). Ces états sont bien sûr détectés en

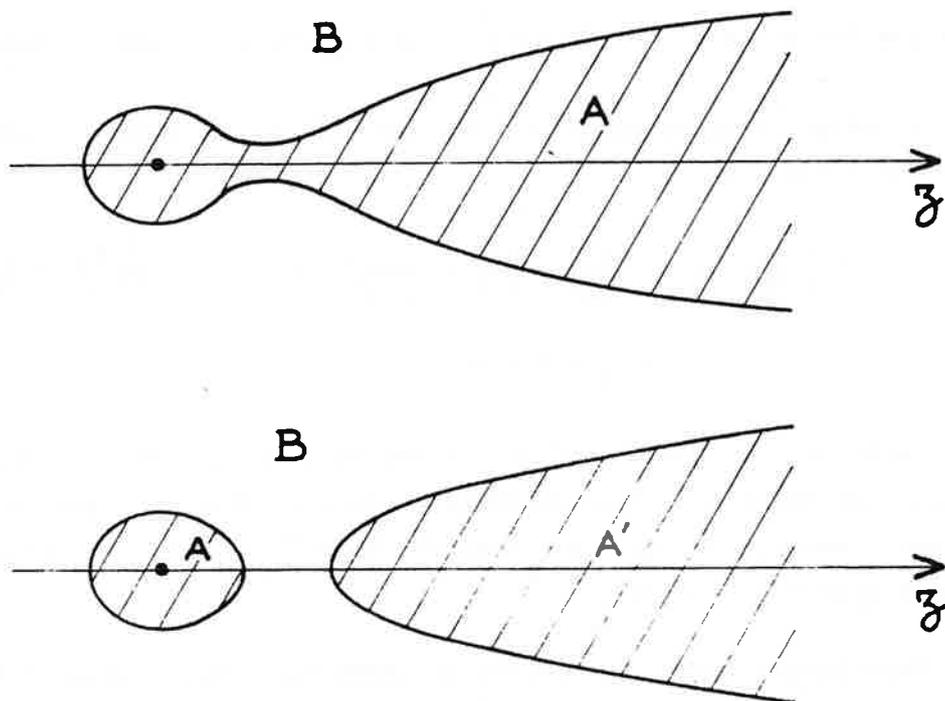


Figure IV-22

Intersection de la surface de potentiel $V(\rho, z)$ avec des plans d'énergie fixée :

- a) l'ionisation est possible dans un modèle classique,
- b) l'ionisation ne peut avoir lieu que par effet tunnel (modèle quantique).

appliquant une impulsion de champ électrique après l'excitation. Nous avons simplement mesuré la valeur minimale du champ électrique F_C pour laquelle apparaît le signal de photoionisation ; F_C est appelé champ électrique de seuil.

Au delà de la valeur même de ce seuil que nous n'interpréterons pas ici, se produit un phénomène particulier : si l'on trace le seuil électrique F_C en fonction de l'énergie E des niveaux considérés on pourrait s'attendre à ce que les états σ^+ et σ^- distants de $\hbar\omega_c$ aient les mêmes champs critiques F_C .

En effet, l'équation de Schrödinger s'écrit en champ électrique et magnétique : (en u.a.)

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \left(\frac{M^2}{\rho^2} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + F + \frac{\gamma^2}{8\rho^2} \right) \psi = E_R \psi$$

où $E_R = E - \frac{\gamma M}{2}$

Cette équation ne dépend que de $|M|$ et donc le spectre d'énergie E_R (aussi bien des états quasi discrets de la zone diamagnétique et de celle de quasi-Landau, que des états associés à un "continuum" d'ionisation) est le même pour $M = +1$ et $M = -1$.

Expérimentalement, on observe un champ électrique seuil différent pour les deux états associés à σ^+ et σ^- et les points expérimentaux s'alignent sur une seule et même courbe.

Tout se passe comme si la méthode de détection des niveaux par ionisation par champ permettait de mesurer l'énergie totale des niveaux, terme paramagnétique compris. Dans un tel cas, la limite d'ionisation est commune à $+M$ et $-M$.

Le phénomène observé n'est pas encore interprété et nécessite des investigations nouvelles ; en particulier il faudrait s'assurer que dans la zone d'interaction les champs électrique, magnétique et la direction du jet soient rigoureusement parallèles pour qu'il n'y ait aucune rupture de symétrie afin que M reste un nombre quantique exact.

CONCLUSION

Nos travaux ont contribué à mettre au point un dispositif expérimental extrêmement performant :

- source laser possédant une résolution spectrale élevée ;
- système où la géométrie entre les directions du jet atomique, du champ magnétique extérieur et du rayonnement excitateur est parfaitement définie ;
- détection très sensible.

Ainsi nous avons pu réaliser une étude systématique et de haute qualité portant sur les spectres d'excitation à un étage d'états de Rydberg de l'atome de Lithium en présence d'un champ magnétique intense.

Dans la zone diamagnétique, nous avons pu comparer nos spectres expérimentaux à ceux calculés en diagonalisant l'Hamiltonien total du système décrivant l'atome de Lithium soumis à un champ magnétique. La position en énergie et l'intensité des composantes des multiplets excités en polarisation σ (états $\pi_z = +1$) et π ($\pi_z = -1$) ont ainsi pu être interprétées. En particulier, nous avons mis en évidence l'importance des effets liés au caractère non coulombien du potentiel central auquel est soumis l'électron optique de l'atome de Lithium. Ces effets modifient sensiblement les nombres d'ondes mais aussi, et de façon plus spectaculaire, les intensités des transitions observées. De plus, nous avons montré que ce caractère non hydrogénoïde est à l'origine des largeurs particulièrement grandes des anticroisements observés, ceux-ci mettant en jeu deux composantes issues de deux multiplets différents. Prévues par des calculs

de diagonalisation, ces largeurs peuvent être aussi interprétées dans un modèle plus physique faisant intervenir explicitement le potentiel central non coulombien créé par les deux électrons du cœur (couche interne $1s^2$).

En champ magnétique faible, l'analyse de la variation dans un multiplet donné - observé aussi bien en polarisation π que σ - de la différence d'énergie entre deux composantes successives a permis de confirmer expérimentalement pour la première fois les deux types de comportement différents qu'avaient pu prédire des théories récentes aussi bien classiques que quantiques. Classiquement les orbites de Képler décrivant les trajectoires d'un électron soumis à un potentiel coulombien sont modifiées par la présence du terme diamagnétique ; cette perturbation peut être décrite par l'évolution au cours du temps du moment cinétique orbital \vec{L} et du vecteur de Lenz \vec{A} : les deux comportements différents sont alors associés à des mouvements soit de libration, soit de rotation. D'un point de vue quantique, ce phénomène se traduit par l'existence d'un invariant adiabatique A associé à une symétrie dynamique approchée ; les deux comportements différents correspondent alors à des signes opposés pour l'invariant adiabatique.

Dans la zone de quasi-Landau, nous avons confirmé l'existence de nombreuses résonances étroites. Etudiant les raies les plus intenses, nous avons pu classer les niveaux correspondants en deux séries notées $K=1$ et $K=2$. Ces séries sont obtenues par prolongement diabatique des deux composantes de plus grande énergie observées en champ magnétique faible dans un multiplet de nombre quantique principal n fixé. L'écart entre deux composantes successives de la série $K=1$ décroît quand l'énergie croît et atteint, à la limite d'ionisation en champ nul, la valeur voisine de $\frac{3}{2}\pi\omega_c$ prédite par des études semi-classiques, valable pour l'état le plus excité de chaque multiplicité, c'est-à-dire pour les états localisés dans le plan $z=0$. Nous avons constaté que la série de niveaux $K=2$ possède un comportement analogue ; ceci met en évidence un résultat remarquable : l'existence de structures périodiques

simples semble être une propriété générale des différentes séries de niveaux quelle que soit la localisation spatiale de l'électron dans les états correspondants.

Enfin, dans une toute autre direction, nous avons étudié l'influence d'un champ magnétique sur les seuils de photoionisation Stark en présence d'un champ électrique ayant même direction que le champ magnétique. Cette étude tout à fait originale a permis de mettre en évidence le phénomène de stabilisation des niveaux par la présence du champ magnétique.

Utilisant la configuration expérimentale actuelle de nombreuses études que nous avons débutées sont à approfondir :

- Nous n'avons fait qu'aborder l'analyse des spectres de quasi-Landau observées pour une polarisation σ du rayonnement excitateur (états $\pi_z = +1$). Il faudrait poursuivre ce travail afin de pouvoir identifier les nombreuses résonances observées et les classer en introduisant un nombre plus important de séries, et ceci pour différentes intensités du champ magnétique. Le même travail reste à faire pour les spectres beaucoup plus complexes obtenus en polarisation π (états $\pi_z = -1$). Ceci permettra de mieux comprendre la structure des résonances de quasi-Landau et conduira sans doute à l'élaboration de modèles théoriques plus raffinés allant au-delà d'une simple approximation adiabatique.
- Un anticroisement en polarisation π s'est révélé avoir une largeur trop faible pour pouvoir être déterminée expérimentalement. Nous envisageons la mise au point d'un système haute résolution (150 MHz, ce qui permettra de mener à bien une étude systématique de la largeur des anticroisements et d'étudier l'évolution de ces largeurs en fonction des caractéristiques des deux états mis en jeu.
- L'étude des seuils de photoionisation en polarisation σ a fait apparaître un problème lié à la différence de comportements des états $M = +1$ et $M = -1$. Ce point semble très intéressant et de nouvelles expériences devront permettre de l'éclaircir. En particulier il faudra

étudier de façon systématique et avec les mêmes techniques expérimentales les seuils d'ionisation d'états $M=0, +1$ et -1 . De plus, il faudra pouvoir s'assurer s'il existe ou non une rupture de symétrie (M n'étant plus alors un nombre quantique exact) due soit aux propriétés internes de l'atome - interaction spin-orbite par exemple -, soit au dispositif expérimental actuellement utilisé. Il faut en effet rappeler que des études effectuées au Laboratoire Aimé Cotton sur les spectres de photoionisation d'atomes en présence d'un champ électrique ont déjà montré l'existence de phénomènes inattendus liés à l'existence d'interactions même trèsfaibles couplant des états discrets à des états du continuum [118, 119]. Une telle étude permettra d'approfondir notre connaissance sur le phénomène d'ionisation par champ électrique d'états de Rydberg d'atomes soumis à un champ magnétique.

- Enfin, il faudra poursuivre l'analyse des spectres dans le domaine d'énergie supérieur à la limite d'ionisation en champ nul, afin de comprendre le phénomène de photoionisation en présence d'un champ magnétique intense. En effet, à des énergies supérieures à celle du premier niveau de Landau, les résonances de quasi-Landau sont couplées aux états du continuum présent dans le spectre de Landau. L'étude des profils (élargissement et assymétrie) nécessitera sans aucun doute également l'utilisation du système haute résolution.

On peut, de plus, envisager une étude dans d'autres schémas d'excitation permettant d'atteindre des états de nombre quantique magnétique $|M|$ plus élevés. Ces états présentent un caractère hydrogénoïde d'autant plus important que $|M|$ sera plus grand. Ceci permettra de poursuivre l'étude expérimentale de l'effet diamagnétique en champ faible pour des états de Rydberg quasi-hydrogénoïde et de vérifier si l'apparition de deux types de comportement liés à l'existence d'une symétrie dynamique approchée dépend effectivement de la valeur du rapport $|M|/n$. Comme nous l'avons signalé, le dispositif expérimental et, en particulier, l'aimant supraconducteur, a été conçu pour permettre une configuration où la vitesse de l'atome est perpendiculaire au champ magnétique. Il sera ainsi possible d'étudier les effets du

champ électrique motionnel. Dans la configuration actuelle, où le champ magnétique est parallèle au jet atomique, il est possible de simuler un tel effet en superposant un champ électrique transversal \vec{F} . Il faudra alors étudier de façon détaillée les résonances étroites apparaissant dans la zone de quasi-Landau et déterminer l'intervalle en énergie entre deux résonances consécutives.

Cette dernière étude se place dans le cadre plus vaste du comportement de l'atome en présence de champs électrique et magnétique croisés. Dans ce domaine, si le régime des champs faibles a déjà été largement étudié, le régime des champs intenses est quasiment vierge. De plus, il est possible théoriquement dans certaines conditions d'obtenir une situation où l'électron est localisé loin de son noyau. Il serait particulièrement intéressant d'observer expérimentalement cette situation originale et d'en déterminer les caractéristiques.

REFERENCES

- [1] L. Landau et E. Lifchitz, Mécanique, Edition MIR , Moscou, 1969.
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, Mécanique Quantique, Tome I et II, Ed. Herman, 1973.
- [3] L. Landau et E. Lifchitz, Mécanique Quantique, Edition MIR , Moscou, 1969.
- [4] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, Quantum Mechanics of one- and two-electron atoms, Springer Verlag, Berlin, 1957.
- [5] W. E. Lamb, Phys. Rev. 85, 259, 1952.
- [6] J. F. Avron, I. W. Herbst et B. Simon, Annals of Physics 114, 431, 1979.
- [7] D. Delande, Thèse de 3ème cycle, Paris VI, 1981.
D. Delande et J. C. Gay, Phys. Lett. 82A, 393, 1981.
D. Delande et J. C. Gay, Phys. Lett. 82A, 399, 1981.
- [8] F. Laloë, Symétries : cours de seconde année, DEA de Physique Atomique et Moléculaire,
- [9] J. W. B. Hughes, Proc. Phys. Soc. 91, 810, 1967 ;
G. Flamand, J. Math. Phys. 7, 1924, 1966.
- [10] M. Bander et C. Itzykson, Rev. Mod. Phys. 38, 330, 1966 ;
38, 346, 1966.
- [11] A. C. Chen, Phys. Rev. A 22, 333, 1980.
- [12] P. J. Redmond, Phys. Rev. 133, B 1352, 1964.
- [13] K. Helfrich, Theoret. Chim. Acta 24, 271, 1982.
- [14] I. C. Percival, J. Phys. B 6, L229, 1973.
- [15] M. Robnik, J. Phys. A 14, 3195, 1981 ; J. de Physique 43, C2, 45, 1982.
- [16] D. Richards, J. de Physique 43, C2, 63, 1982 ; J. Phys. B 16, 749, 1983.

- [17] D. R. Herrick, Phys. Rev. A 26, 323, 1982.
- [18] M. J. Englefield, Group theory and the Coulomb problem, Wiley, New York, 1972.
- [19] M. L. Zimmerman, M. M. Kash, D. Kleppner, Phys. Rev. Lett. 45, 1092, 1980.
- [20] A. F. Starace, J. Phys. B 6, 585, 1973.
- [21] W. R. S. Garton et F. S. Tomkins, Astrophys. J. 158, 839, 1969.
- [22] R. H. Garstang, Rep. Prog. Phys. 40, 105, 1977.
- [23] V. Canuto et D. C. Kelly, Astrophys. Space Sci. 17, 277, 1972.
- [24] R. J. Fonck, F. L. Roesler, D. H. Tracy et F. S. Tomkins, Phys. Rev. A 21, 861, 1980.
- [25] L. D. Landau, Z. Phys. 64, 629, 1930.
- [26] J. C. Gay, Comments Atom. Mol. Phys. 9, 97, 1980.
- [27] C. Chardonnet, Thèse de 3ème cycle, Paris VI, 1983.
- [28] L. C. Biedenharn, J. Math. Phys. 2, 433, 1961.
- [29] D. R. Herrick, M. E. Kellman et R. D. Poliak, Phys. Rev. A 22, 1517, 1980.
- [30] J. C. Gay, L. R. Pendrill et B. Cagnac, Phys. Lett. 72A, 315, 1979.
- [31] H. Crosswhite, U. Fano, K. T. Lu et A. R. P. Rau, Phys. Rev. Lett. 42, 963, 1979.
- [32] E. Korevaar, M. G. Littman, J. Phys. B 16, L 437, 1983.
- [33] F. Penent, Thèse de 3ème cycle, Paris VI, 1984.
- [34] F. Penent, C. Chardonnet, D. Delande, F. Biraben, J. C. Gay, J. de Physique C7, 193, 1983.
- [35] T. P. Grozdanov, E. A. Solov'ev, J. Phys. B 15, 1195, 1982.
- [36] A. R. P. Rau, J. Phys. B 12, L193, 1979.
- [37] S. K. Bhattacharya et A. R. P. Rau, Phys. Rev. A 26, 2315, 1982.
- [38] R. J. Fonck, D. H. Tracy, D. C. Wright et F. S. Tomkins, Phys. Rev. Lett. 40, 1366, 1978.
- [39] J. C. Gay, D. Delande, F. Biraben, J. Phys. B 13, L729, 1980.
- [40] D. Delande, C. Chardonnet, F. Biraben et J. C. Gay, J. de Physique C2, 43, 97, 1982.
- [41] N. P. Economou, R. R. Freeman, P. F. Liao, Phys. Rev. A 18, 2506, 1978.
- [42] K. T. Lu, F. S. Tomkins, W. R. S. Garton, Proc. Phys. Soc. A 362, 421, 1978.

- [43] J. D. Talman, Nucl. Phys. A 141, 273, 1970.
- [44] H. Friedrich, Phys. Rev. A 26, 1827, 1982.
- [45] J. Simola et J. Virtamo, J. Phys. B 11, 3309, 1978.
- [46] W. Rösner, G. Wunner, H. Herold et H. Ruder, J. Phys. B 17, 29, 1984.
- [47] J. Virtamo, J. Phys. B 9, 751, 1976.
- [48] P. Pröschel, W. Rösner, G. Wunner, H. Ruder et H. Herold, J. Phys. B 15, 1959, 1982.
- [49] H. Friedrich et M. C. Chu, Phys. Rev. A 28, 1423, 1983.
- [50] M. C. Chu et H. Friedrich, Phys. Rev. A 28, 3651, 1983.
- [51] M. C. Chu et H. Friedrich, Phys. Rev. A 29, 675, 1984.
- [52] C. W. Clark, Phys. Rev. A 28, 83, 1983.
- [53] C. H. Greene, Phys. Rev. A 28, 2209, 1983.
- [54] S. K. Bhattacharya et Shih-I Chu, J. Phys. B 16, L471, 1983.
- [55] E. R. Smith, R. J. W. Henry, R. F. O'Connell et A. K. Rajagopal, Phys. Rev. D 6, 3700, 1972.
- [56] C. W. Clark, Phys. Rev. A 24, 605, 1981.
- [57] J. J. Labarthe, J. Phys. B 14, L467, 1981.
- [58] M. L. Zimmerman, R. G. Hulet et D. Kleppner, Phys. Rev. A 27, 2731, 1983.
- [59] M. L. Zimmerman, M. G. Littman, M. M. Kash et D. Kleppner, Phys. Rev. A 20, 2251, 1979.
- [60] D. R. Bates et A. Damgaard, Philos. Trans. R. Soc. London A 242, 101, 1945.
- [61] L. J. Schiff et H. Snyder, Phys. Rev. 55, 59, 1939.
- [62] F. A. Jenkins et E. Segré, Phys. Rev. 55, 52, 1939.
- [63] R. J. Fonck, F. L. Roesler, D. H. Tracy, K. T. Lu, F. S. Tomkins, W. R. S. Garton, Phys. Rev. Lett. 39, 1513, 1977.
- [64] C. H. Harper, M. D. Levenson, Optics Commun. 20, 107, 1977.
- [65] M. L. Zimmerman, J. C. Castro, D. Kleppner, Phys. Rev. Lett. 40, 1083, 1978.
- [66] A. R. Edmonds, J. Phys. B 6, 1603, 1973.
- [67] C. W. Clark et K. T. Taylor, J. Phys. B 13, L737, 1980.
- [68] C. W. Clark et K. T. Taylor, J. Phys. B 15, 1175, 1982.
- [69] M. L. Zimmerman, M. M. Kash et G. R. Welch, J. de Physique C2 43, 113, 1982.

- [70] M. G. Littman, M. M. Kash et D. Kleppner, Phys. Rev. Lett. 41, 103, 1978.
- [71] N. Komarov, T. P. Grozdanov et R. K. Janev, J. Phys. B 13, L573, 1980.
- [72] E. A. Solov'ev, JETP Letters 34, 265, 1981.
- [73] J. B. Delos, S. K. Knudson, D. W. Noid, Phys. Rev. Lett. 50, 579, 1983.
- [74] J. B. Delos, S. K. Knudson, D. W. Noid, Phys. Rev. A 28, 7, 1983.
- [75] J. C. Gay et D. Delande, Comm. At. Mol. Phys. 13, 275, 1983.
- [76] J. C. Gay, D. Delande, F. Biraben et F. Penent, J. Phys. B 16, L693, 1983.
- [77] F. Ravndal et T. Toyoda, Nuclear Phys. B 3, 312, 1967.
- [78] W. Pauli, Z. Phys. 36, 336, 1926.
- [79] P. A. Braun, J. Phys. B 16, 4323, 1983.
- [80] A. P. Kazantsev, V. L. Pokrovsky et J. Bergou, Phys. Rev. A 28, 3659, 1983.
- [81] K. T. Lu, F. S. Tomkins, H. M. Crosswhite, H. Crosswhite, Phys. Rev. Lett. 41, 1034, 1978.
- [82] J. C. Castro, M. L. Zimmerman, R. G. Hulet et D. Kleppner, Phys. Rev. Lett. 45, 1780, 1980.
- [83] A. R. Edmonds, J. de Physique C4 31, 71, 1970.
- [84] A. Messiah, Mécanique Quantique, Tome I et II, Dunod, Paris, 1960.
- [85] E. C. Kemble, "The Fundamental Principles of Quantum Mechanics", Mc Graw Hill, New York, 1937.
- [86] B. Zaslav et M. E. Zandler, Amer. J. Phys. 35, 118, 1967.
- [87] J. A. C. Gallas et R. F. O'Connell, J. Phys. B 15, L593, 1982.
- [88] J. A. C. Gallas et R. F. O'Connell, J. Phys. B 15, L75, 1982.
- [89] J. A. C. Gallas et R. F. O'Connell, J. Phys. B 15, L309, 1982.
- [90] S. Nuzzo et M. R. C. McDowell, J. Phys. B 16, 3895, 1983.
- [91] S. Feneuille, Phys. Rev. A 26, 673, 1982.
- [92] C. Angelié, Thèse de 3ème cycle, Paris VI, 1978.
- [93] C. Angelié et C. Deutsch, Phys. Lett. 67A, 357, 1978.
- [94] J. A. C. Gallas, E. Gerck et R. F. O'Connell, Phys. Rev. Lett. 50, 324, 1983.

- [95] E. Gerck, J. A. C. Gallas et A. B. d'Oliveira, *Phys. Rev. A* 26, 662, 1982.
- [96] H. Hasegawa, "Physics of Solids in Intense Magnetic Fields", ed. E. D. Haidemenakis, Plenum, New York 246, 1969.
- [97] D. Delande, C. Chardonnet et J. C. Gay, *Optics Commun.* 42, 25, 1982.
- [98] L. Cabaret, Mémoire Ingénieur C.N.A.M., 1982.
- [99] S. Gerstenkorn et P. Luc, "Atlas du spectre d'absorption de la molécule d'iode", 1978.
- [100] J. Juncar et J. Pinard, *Optics Commun.* 14, 438, 1975.
- [101] M. F. Moussely, Thèse de Docteur-Ingénieur, Orsay, 1982.
- [102] J. M. Halbout, S. Blit, W. Donaldson, C. L. Tang, *IEEE J. Quantum Electron.*, Vol. QE15, 1176, 1979.
- [103] C. E. Moore, "Atomic Energy Levels", NBS Washington D.C., 1952.
- [104] M. Klapisch, *Comput. Phys. Commun.* 2, 239, 1971.
- [105] A. Farrag, E. Luc-Koenig, J. Sinzelle, *J. Phys. B* 13, 3939, 1980.
- [106] D. Delande, J. C. Gay, Soumis à *J. Phys. B Lett.*
- [107] S. Feneuille, *J. de Physique C2* 43, 13, 1982.
- [108] R. J. Damburg et V. V. Kolosov, *J. Phys. B* 9, 3149, 1976.
- [109] E. Luc-Koenig et A. Bachelier, *J. Phys. B* 13, 1743 et 1749, 1980.
- [110] D. A. Harmin, *Phys. Rev. A* 24, 2491, 1981.
- [111] D. A. Harmin, *Phys. Rev. A* 26, 2656, 1982.
- [112] E. Luc-Koenig, S. Feneuille, J. M. Lecomte, S. Liberman, J. Pinard et A. Taleb, *J. de Physique C2* 43, 153, 1982.
- [113] T. W. Ducas, M. G. Littman, R. R. Freeman et D. Kleppner, *Phys. Rev. Lett.* 35, 366, 1975.
- [114] J. C. Gay, *Progress in Atomic Spectroscopy, Part C*, 6, 177, 1984.
- [115] C. W. Clark, K. T. Lu et A. F. Starace, *Progress in Atomic Spectroscopy, Part C*, 7, 247, 1984.
- [116] R. J. Elliot et R. Loudon, *J. Phys. Chem. Solids* 8, 382, 1959.
- [117] J. L. Kemp, *Astrophys. J.* 162, 169, 1970.
- [118] A. Taleb, Thèse de Doctorat d'Etat, Paris-Sud, Orsay, 1982.
- [119] J. M. Lecomte, Thèse de 3ème cycle, Paris-Sud, Orsay, 1983.

Le présent travail a été effectué au Laboratoire Aimé Cotton pendant les années 1982 à 1984. Je remercie Monsieur Sylvain LIBERMAN de m'y avoir accueilli et de m'avoir placé ainsi dans un environnement scientifique exceptionnel.

L'ambiance sympathique créée par l'ensemble du personnel du laboratoire m'a beaucoup aidé et je tiens à les remercier tous, chercheurs, enseignants, techniciens. J'ai été initié dans l'art de la mécanique, de la tôlerie, du soufflage de verre, des colorants (de trop près parfois), cela a été très enrichissant pour moi.

J'ai eu surtout l'immense chance de travailler dans une équipe formidable. Messieurs Louis CABARET et Alain RICHARD m'ont fait profiter de leur grande compétence et ont répondu avec bonne humeur à mes nombreuses questions.

Madame Eliane LUC-KOENIG a pris une part importante dans la partie théorique de ce travail. Les nombreuses discussions que nous avons eues ont été très enrichissantes pour moi. Je la remercie pour tout ceci et pour sa grande efficacité.

Je n'ai pu trouver de formules pour remercier Madame Claudine THOMAS, ma gentille collaboratrice et caïmanne et Monsieur Jacques PINARD, mon chef bien-aimé, ils savent combien je leur suis reconnaissant pour les moments agréables que j'ai passés en leur compagnie.

Mes plus vifs remerciements vont à Monsieur Jean-Pierre BRIAND pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail en acceptant de présider le Jury.

Je tiens à remercier Monsieur Jean-Claude GAY pour sa participation à ce Jury, sur un sujet qu'il connaît bien ; j'y suis particulièrement sensible.

Je n'oublie pas mes origines, aussi je remercie tous les enseignants qui m'ont fait parvenir là où je suis.

Mes camarades de l'E. N. S. m'ont beaucoup aidé et encouragé, je leur en suis très reconnaissant.

Un grand merci à Monsieur Bernard DEMARETS pour la réalisation des superbes dessins de ce mémoire et un grand bravo à Madame FONTAINE qui a assuré la frappe dans un temps record avec gentillesse et efficacité.

J'espère que tout le monde me pardonnera un dernier jeu de mots :

"Les champs magnétiques sont les champs les plus beaux".

