





Université de Montréal

Conception d'un environnement de simulation pour le  
calcul de profils d'élargissement Stark  
des raies d'hélium neutre

par

**Patrick Tremblay**

Département de physique  
Faculté des arts et des sciences

Mémoire présenté à la Faculté des études supérieures et postdoctorales  
en vue de l'obtention du grade de  
Maître ès sciences (M.Sc.)  
en Physique

juin 2020



**Université de Montréal**

Faculté des études supérieures et postdoctorales

Ce mémoire intitulé

**Conception d'un environnement de simulation pour le  
calcul de profils d'élargissement Stark  
des raies d'hélium neutre**

présenté par

**Patrick Tremblay**

a été évalué par un jury composé des personnes suivantes :

*Patrick Dufour*

---

(président-rapporteur)

*Pierre Bergeron*

---

(directeur de recherche)

*Alain Beauchamp*

---

(co-directeur)

*Laurence Perreault Levasseur*

---

(membre du jury)

Mémoire accepté le :

*16 juin 2020*

---



# Sommaire

---

Ce mémoire porte sur l'étude des étoiles naines blanches de type DB, dont le spectre est dominé par les raies d'hélium neutre. Des travaux récents ont révélé que les paramètres physiques mesurés à l'aide de la méthode dite spectroscopique — notamment la température effective et la masse de l'étoile — posaient problème pour ce type de naine blanche. Nous avons dans cette étude réexaminé un des ingrédients essentiels de cette méthode, soit le calcul de profils d'élargissement Stark des raies d'hélium neutre. Ce problème fut abordé il y a 25 ans par notre groupe de recherche en utilisant la théorie standard de l'élargissement Stark. Les profils semi-analytiques calculés dans le cadre de cette théorie considèrent les électrons comme étant dynamiques et les ions statiques. Avec l'amélioration de la puissance numérique des ordinateurs, d'autres groupes de recherche ont grandement amélioré le traitement de l'élargissement Stark en produisant des simulations numériques décrivant en détail la dynamique et les interactions des perturbateurs (ions et électrons) près de l'émetteur (l'atome d'hélium dans notre cas). Ils n'ont cependant généré de tables de profils Stark, applicables au calcul de spectres synthétiques d'étoiles naines blanches, que pour deux raies de l'atome d'hélium.

Dans ce mémoire, nous décrivons la conception de notre propre environnement de simulation incluant certains aspects importants considérés dans les travaux précédents (unification du traitement des ions et électrons, correction pour la dynamique des ions, transition de la contribution des électrons à l'élargissement, du coeur aux ailes du profil, intégration numérique de l'opérateur quantique d'évolution temporelle de l'hélium perturbé par un champ électrique fluctuant, correction de Debye pour la corrélation du mouvement des perturbateurs chargés, variation de densité locale et réinjection de particules) afin de mieux représenter l'environnement dynamique de l'atome d'hélium. Des étapes intermédiaires, comme la construction de l'espace de simulation et le modèle quasi-statique, nous ont permis de valider

cet espace de simulation ainsi que le respect de la statistique du système. Une fois ces étapes de validation franchies, nous avons produit des grilles de profils Stark pour les deux raies les plus importantes de l'atome d'hélium dans le domaine du visible, soit He I  $\lambda 4471$  et He I  $\lambda 4922$ , pour des températures entre 10,000 K et 40,000 K et des densités électroniques entre  $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  et  $6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Une comparaison avec d'autres résultats publiés démontre que nos calculs rivalisent avec les meilleurs profils obtenus dans le domaine des simulations numériques de l'élargissement Stark. L'élaboration de cet outil ouvre la voie à la création d'une nouvelle génération de modèles d'atmosphères de naines blanches qui nous permettra de raffiner l'analyse spectroscopique de ces objets.

**Mots clefs** : étoiles : atmosphères — matière dense — naines blanches — opacité — raies : profils — simulation numérique

# Summary

---

This thesis deals with the study of white dwarf stars of the DB type, whose spectrum is dominated by neutral helium lines. Recent work has revealed that physical parameters — namely the effective temperature and the stellar mass — measured using the so-called spectroscopic technique are problematic for this type of white dwarf. In this study, we re-examine one of the essential ingredients of this method, namely the calculation of Stark broadening profiles of neutral helium lines. This problem was addressed 25 years ago by our research group using the standard Stark broadening theory. Semi-analytical profiles calculated under this theory consider electrons as dynamic and ions as static. With the improvement of computer numerical power, other research groups have significantly improved the treatment of Stark broadening by producing numerical simulations describing in detail the dynamics and interactions of the perturbers (ions and electrons) near the emitter (the helium atom in our case). However, they generated Stark profile tables, applicable to the computation of synthetic spectra for white dwarf stars, for only two lines of the helium atom.

In this thesis, we describe the creation of our own simulation environment including some important aspects considered in previous work (unification of ion and electron treatment, correction for ion dynamics, transition of the electron contribution to broadening from the core to the wings of the profile, numerical integration of the quantum operator of the time evolution of helium perturbed by a fluctuating electric field, Debye correction for the correlation of the motion of charged perturbers, local density variation and particle reinjection) in order to better represent the dynamical environment of the helium atom. Intermediate steps, such as the construction of the simulation space and the quasi-static model, allowed us to validate this simulation space and the respect of the system statistics. Once these validation steps were completed, we produced grids of Stark profiles for the two most important lines of the helium atom in the optical, namely He I  $\lambda 4471$  et He I  $\lambda 4922$ , for temperatures between

10,000 K and 40,000 K and electronic densities between  $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  and  $6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . A comparison with other published results shows that our calculations rival the best profiles obtained in the field of numerical simulations of Stark broadening. The development of this tool paves the way for the creation of a new generation of white dwarf atmosphere models that will allow us to refine the spectroscopic analysis of these objects.

**Keywords** : dense matter — line : profiles — numerical simulation — opacity — quantum physics — stars : atmosphere — white dwarf

# Table des matières

---

<b>Sommaire</b> .....	v
<b>Summary</b> .....	vii
<b>Liste des tableaux</b> .....	xiii
<b>Liste des figures</b> .....	xv
<b>Remerciements</b> .....	xix
<b>Chapitre 1. Introduction</b> .....	1
1.1. Déclaration de l'étudiant .....	9
<b>Chapitre 2. Caractérisation des raies du spectre électromagnétique</b> .....	11
2.1. Calcul de l'opacité monochromatique .....	11
2.2. Les processus d'élargissement .....	12
2.3. Étude quantique de l'élargissement Stark .....	14
2.4. Les éléments de matrice dipolaire de l'atome d'hélium .....	20
<b>Chapitre 3. Évolution temporelle</b> .....	25
3.1. Opérateur d'évolution temporelle .....	26
3.2. Fonction d'autocorrélation .....	28
3.3. Dérivation complète de la fonction d'autocorrélation .....	29
3.4. Changement de base de la fonction d'autocorrélation matricielle .....	34
3.5. Résolution de l'équation de Schrödinger .....	37

3.5.1.	Champ électrique constant dans le temps.....	37
3.5.2.	Champ électrique variable dans le temps.....	38
<b>Chapitre 4.</b>	<b>Description de l'espace de simulation.....</b>	<b>41</b>
4.1.	Approximations du modèle.....	41
4.1.1.	Dynamique des perturbateurs.....	41
4.1.2.	Influence des perturbateurs.....	42
4.2.	Générateur de nombres aléatoires et distribution uniforme.....	45
4.3.	Méthodes de distribution de particules.....	47
4.3.1.	Axes sphériques.....	47
4.3.2.	Axes d'impact.....	52
4.3.2.1.	Approche de Hegerfeldt.....	52
4.3.2.2.	Approche de Gigosos.....	63
4.3.2.3.	Méthode hybride.....	72
<b>Chapitre 5.</b>	<b>Modèle quasi-statique.....</b>	<b>75</b>
5.1.	Résolution de la matrice de valeurs propres $\Omega$ .....	76
5.1.1.	Champ électrique dans la direction $z$ .....	76
5.1.2.	Champ électrique dans une direction aléatoire.....	80
5.2.	Validation du profil quasi-statique.....	82
<b>Chapitre 6.</b>	<b>Ajustement des profils dynamiques.....</b>	<b>85</b>
6.1.	Résultats bruts des profils dynamiques.....	85
6.2.	Validation des profils dynamiques.....	87
<b>Chapitre 7.</b>	<b>New Calculations of Stark Broadened Profiles for Neutral Helium Lines Using Computer Simulations.....</b>	<b>91</b>
7.1.	Abstract.....	91

7.2.	Introduction .....	92
7.3.	Theoretical Background .....	95
7.3.1.	Fundamental Aspects of the Stark Broadening Theory .....	95
7.3.2.	Classical Path Approximation .....	98
7.3.3.	Calculation of the Autocorrelation Function .....	100
7.4.	Standard Stark Broadening Theory .....	101
7.4.1.	Basic Principles .....	101
7.4.2.	The Impact Approximation .....	103
7.4.3.	The One-Electron Theory .....	105
7.4.4.	Summary of Approximations .....	105
7.5.	Computer Simulations .....	106
7.5.1.	Overview of the Approach .....	106
7.5.2.	Properties of the Simulation Volume .....	107
7.5.2.1.	The Perturber-Emitter Interaction .....	107
7.5.2.2.	The Simulation Volume and the Impact Coordinate System .....	108
7.5.3.	Generation and Reinjection of Particles .....	109
7.5.4.	The Time Evolution Operator .....	112
7.6.	Results .....	114
7.6.1.	Helium Transitions with Upper Level $n = 4$ .....	115
7.6.1.1.	He I $\lambda 4471$ .....	115
7.6.1.2.	He I $\lambda 4922$ .....	117
7.6.2.	Helium Transitions with Upper Level $n = 3$ .....	121
7.6.3.	Helium Transitions with Upper Level $n > 4$ .....	124
7.7.	Conclusion .....	124
	Acknowledgments .....	127
7.8.	Appendix: The Perturbed He I State Basis .....	127

<b>Chapitre 8. Conclusion</b> .....	129
<b>Bibliographie</b> .....	133
<b>Annexe A. Transformée de Fourier numérique</b> .....	A-i
A.1. Problèmes numériques de la transformée de Fourier.....	A-v
A.1.1. Discrétisation de l'espace.....	A-v
A.1.2. Transformée de Fourier tronquée.....	A-vii
<b>Annexe B. Technique de triage des énergies</b> .....	B-i
<b>Annexe C. Algorithme multi-machines</b> .....	C-i
C.1. Architecture de l'ordinateur.....	C-i
C.2. Logique de l'algorithme.....	C-ii
<b>Annexe D. Lissage des profils dynamiques</b> .....	D-i
D.1. Algorithme de Savitzky-Golay.....	D-i
D.2. Adaptations de l'algorithme aux profils théoriques.....	D-ii

# Liste des tableaux

---

2.1	Coefficients de Clebsch-Gordan $C(\ell'1\ell; m'\mu m)$ .....	22
-----	---	----



## Liste des figures

---

1.1	Spectres d'étoiles des naines blanches de type DO et DB en fonction de la température effective .....	3
1.2	Distribution des gravités de surface des naines blanches de type DB en fonction de la température effective .....	5
2.1	Niveaux d'énergie de l'atome d'hélium .....	17
4.1	Distributions de probabilité du microchamp en fonction des propriétés physiques de l'environnement .....	44
4.2	Exemple de distribution pour un type de particule .....	49
4.3	Variation de la distribution de champs électriques en fonction de la température pour 10,000 volumes de simulation .....	50
4.4	Variation de la distribution de champs électriques en fonction de la température pour 50,000 volumes de simulation. ....	51
4.5	Variation de la distribution de champs électriques en fonction de la densité pour 10,000 volumes de simulation .....	52
4.6	Variation de la distribution de champs électriques en fonction de la densité pour 50,000 volumes de simulation .....	53
4.7	Variation de la distribution de champs électriques en fonction de la température pour un multiple du rayon de Debye de 3 .....	54
4.8	Variation de la distribution de champs électriques en fonction de la densité pour un multiple du rayon de Debye de 3 .....	55
4.9	Variation de la distribution de champs électriques en fonction de la température pour un multiple du rayon de Debye de 5 .....	56

4.10	Variation de la distribution de champs électriques en fonction de la densité pour un multiple du rayon de Debye de 5.....	57
4.11	Illustration des coordonnées des axes d'impact.....	58
4.12	Représentation de l'interpolation de la distribution de vitesse de Hegerfeldt.....	61
4.13	Comparaison de la distribution maxwellienne des vitesses théorique et celle obtenue numériquement.....	62
4.14	Vérification de l'isotropie de l'espace produit.....	63
4.15	Représentation graphique de la technique de réinjection de particules.....	69
4.16	Représentation des trajectoires possibles lors de la réinjection de particules.....	70
4.17	Représentation de l'effet d'une mauvaise réinjection de particules dans le système	71
4.18	Représentation du volume de simulation adopté.....	72
4.19	Variation locale de la densité respectant la distribution de Poisson.....	73
5.1	Fonctions d'autocorrélation et profils extraits dans le régime quasi-statique pour He I $\lambda 4471$ .....	83
5.2	Fonctions d'autocorrélation et profils extraits dans le régime quasi-statique pour He I $\lambda 4922$ .....	84
6.1	Profils bruts des raies He I $\lambda\lambda 4471$ et 4922.....	87
6.2	Profils lissés des raies He I $\lambda\lambda 4471$ et 4922.....	88
6.3	Profils des raies He I $\lambda\lambda 4471$ et 4922 comparés avec la littérature.....	89
7.1	He I $\lambda 4471$ line comparison for $N_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .....	115
7.2	He I $\lambda 4471$ line comparison for an electron number density of $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .....	116
7.3	He I $\lambda 4471$ line comparison for an electron number density of $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .....	116
7.4	He I $\lambda 4471$ line comparison for an electron number density of $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ without a local density variation.....	118
7.5	He I $\lambda 4922$ line comparison for an electron number density of $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .....	119

7.6	He I $\lambda 4922$ line comparison for an electron number density of $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .....	119
7.7	He I $\lambda 4922$ line comparison for an electron number density of $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .....	120
7.8	He I $\lambda 4922$ line comparison for an electron number density of $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ without a local density variation.....	120
7.9	He I $\lambda 5877$ line comparison for an electron number density of $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .....	121
7.10	He I $\lambda 6678$ line comparison for an electron number density of $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .....	122
7.11	He I $\lambda 6678$ line comparison for an electron number density of $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ with static ions .....	122
7.12	He I $\lambda 4026$ line comparison for an electron number density of $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .....	125
7.13	He I $\lambda 4144$ line comparison for an electron number density of $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .....	125
B.1	Variation de la valeur propre en fonction du champ électrique sans technique de triage.....	B-ii
B.2	Variation de la valeur propre en fonction du champ électrique avec la technique de triage.....	B-iii
B.3	Variation de la valeur propre en fonction du temps avec la technique de triage..	B-iv
C.1	Schéma de l'algorithme de la simulation .....	C-iii
D.1	Fonctionnement de l'algorithme de Savitzky-Golay .....	D-iii



# Remerciements

---

Je tiens à remercier tout d'abord Pierre Bergeron et Alain Beauchamp, sans qui ma maîtrise n'aurait pas été aussi engageante. Ils ont accepté de prendre le risque que j'entame un projet ambitieux dont les résultats, au bout des deux ans prévus de la maîtrise, étaient imprévisibles. Malgré les doutes, leur soutien était essentiel dans l'accomplissement de cette tâche, ce qui m'a permis de produire un outil théorique qui ouvrira d'importantes avenues de recherche pour le domaine des naines blanches. Ils ont aussi su être patients et relâcher la pression que je m'impose trop souvent. J'ai encore du chemin à faire sur cet aspect, mais je sais que je suis entouré de la meilleure équipe pouvant m'apprendre à réduire cette pression. Je les remercie aussi pour m'avoir donné l'opportunité de présenter, par l'entremise d'une présentation orale, les résultats de mes travaux à la conférence de l'Union Astronomique Internationale à Hawaii devant la communauté scientifique des étoiles naines blanches.

Un remerciement doit également être attribué à Pierre Brassard qui gère la grappe d'ordinateurs du groupe de recherche des naines blanches, sans laquelle mon projet n'aurait jamais été au point où nous l'avons mené dans le délai de 2 ans. Dans la même branche, je remercie Luc Turbide pour sa gestion du réseau d'ordinateurs du groupe d'astrophysique, de la résolution de tous les petits problèmes que personne ne sait comment régler même si c'est simple, et de son travail lors du déménagement au nouveau campus universitaire.

La complexité de mon projet de maîtrise m'a forcé à repousser mes connaissances acquises lors de mon cheminement, plus particulièrement sur le plan numérique. Heureusement, j'ai pu me rabattre sur certains de mes travaux effectués dans les cours de Paul Charbonneau (hydrodynamique et relativité générale), qui nécessitaient la production d'animations pour mieux comprendre le fonctionnement d'un phénomène, et de mes travaux avec Nicole Saint-Louis qui nécessitaient l'utilisation de calculs numériques en parallèle. Je les remercie des

outils et des opportunités d'apprentissage dans le domaine complexe que peuvent représenter les procédures numériques.

Je remercie aussi mes collègues du groupe de recherche des naines blanches, soit Antoine Bédard, Olivier Vincent et François Hardy pour l'écoute qu'ils ont eue, leur aide et les rires que nous avons partagés. Sans eux, la charge psychologique de ce projet aurait été difficilement surmontable.

Enfin, je remercie la Faculté des études supérieures et postdoctorales de l'Université de Montréal, le Fonds québécois de la recherche sur la nature et les technologies et Hydro-Québec pour leur soutien financier.

Une mention spéciale doit être ajoutée à propos de mon codirecteur Alain Beauchamp. Il a accepté de se lancer dans ce projet de codirection par simple amour de la science en continuant son emploi dans le domaine privé. Malgré cette grande charge de travail, sa dévotion quant à l'accomplissement de ce projet était inébranlable. Il n'y a aucun mot pour remercier ou même honorer l'accomplissement d'Alain. En plus de cela, il a accepté de poursuivre cette codirection dans le cadre de mon doctorat. Il aura toujours mon admiration et comme il dirait dans de simples paroles remplies de sagesse : « Tsigidou ».

# Chapitre 1

---

## Introduction

Une fois son cycle nucléaire terminé, une étoile sur la séquence principale dont la masse est inférieure à  $\sim 8 M_{\odot}$  terminera sa vie sous la forme d'une étoile naine blanche, un objet compact ayant une masse comparable à celle du Soleil mais un rayon similaire à celui de la Terre. La gravité de surface des naines blanches se situe autour de  $\log g \sim 8$  et leur température effective varie entre  $T_{\text{eff}} \sim 3500$  K à 150,000 K (Fontaine et al., 2001). Ayant épuisé leur source de carburant nucléaire, ces étoiles ne font que se refroidir au cours de leur évolution sur une période de plusieurs milliards d'années. Ainsi, avec une bonne compréhension des mécanismes de refroidissement des étoiles naines blanches, il est possible d'exploiter le potentiel de ces objets comme traceurs de l'âge de différentes populations stellaires, telles le disque de la Galaxie (Winget et al., 1987; Oswalt et al., 1996; Leggett et al., 1998; Gianninas et al., 2015), les amas ouverts (Richer et al., 1998; von Hippel & Gilmore, 2000; Bedin et al., 2005; García-Berro et al., 2010), les amas globulaires (Hansen et al., 2002, 2004, 2007; Bedin et al., 2009), etc. Ces mécanismes de refroidissement ont été étudiés en profondeur et sont maintenant relativement bien compris (Lamb & van Horn, 1975; Wood, 1992; Hansen, 1999; Fontaine et al., 2001; Renedo et al., 2010). L'interprétation des âges en termes de séquences de refroidissement détaillées repose toutefois sur notre capacité à mesurer la température effective, la masse et la composition d'échantillons volumineux d'étoiles naines blanches.

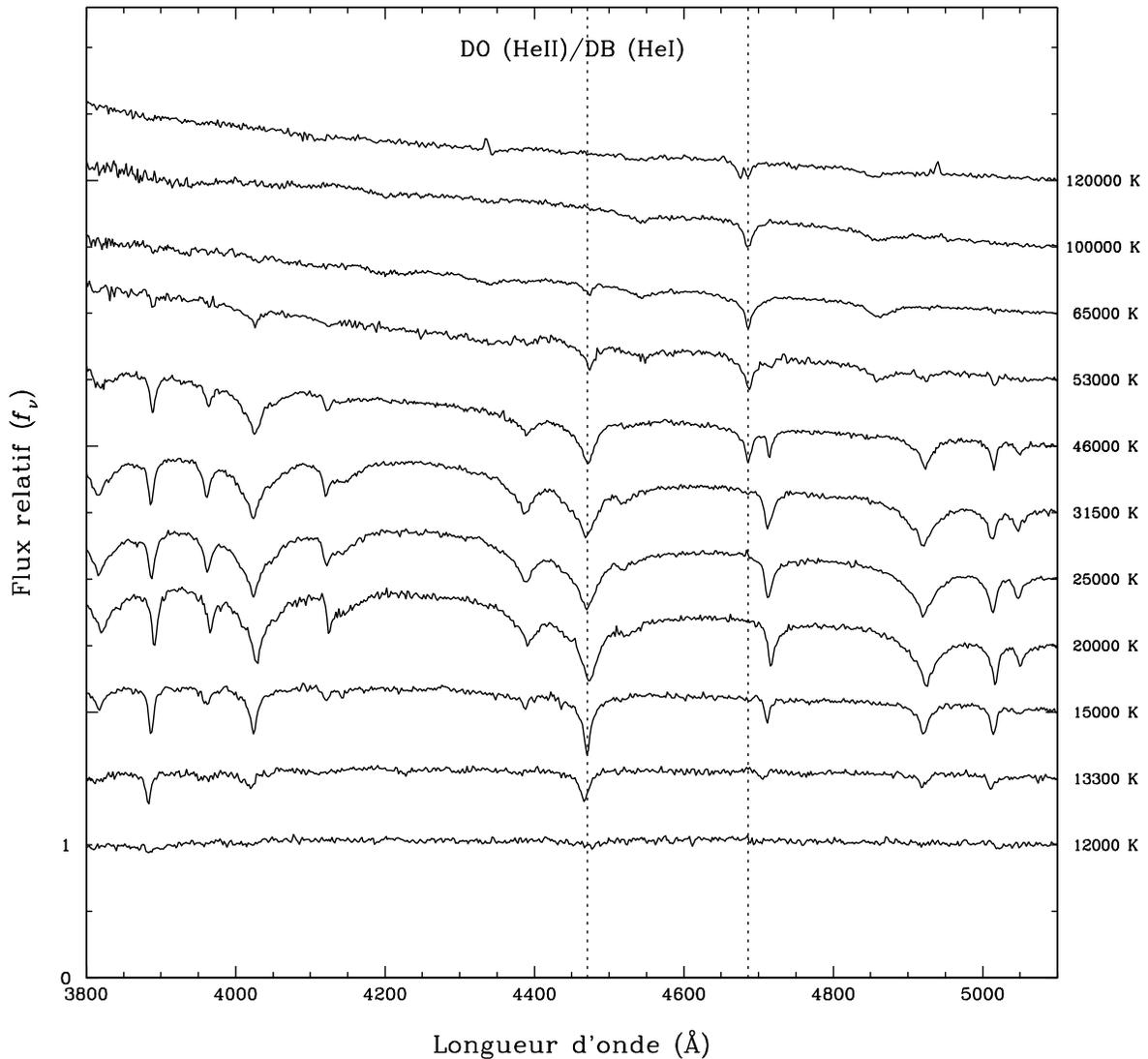
La principale source d'information sur les naines blanches est la lumière qui nous provient de leur photosphère. En général, la distribution d'énergie d'une étoile diffère de celle d'un corps noir parce que les photons qui parviennent à la Terre interagissent avec la matière présente dans les régions atmosphériques de l'étoile. Cette interaction est caractérisée par une quantité physique que l'on nomme opacité. Selon la nature de ces interactions, le milieu

devient opaque sur un intervalle de longueurs d'ondes plus ou moins important. Dans le cas où un photon est absorbé par un ion ou un atome, l'énergie du photon incident est convertie en énergie d'excitation qui permet à l'électron de changer de niveau d'énergie vers un état excité (transition dite du type lié-lié). Si l'énergie du photon est assez grande, l'électron peut être éjecté, rendant la particule ionisée (transition du type lié-libre). Il est également possible pour un électron libre de passer près d'une particule, formant ainsi un ion ou un atome temporaire qui peut interagir avec un photon; le photon absorbé lors d'un tel processus contribue à augmenter l'énergie cinétique de cet électron (transition du type libre-libre). Les intervalles de longueurs d'ondes affectés par ces différents processus dépendent étroitement de la composition chimique de l'atmosphère ainsi que de ses propriétés physiques, notamment la température et la densité.

Il existe plusieurs types d'étoiles naines blanches que l'on distingue par leur type spectral, déterminé par la présence des raies d'absorption dans le spectre visible (ou ultraviolet dans un cas particulier). Si le spectre ne présente que des raies d'hydrogène, la naine blanche sera de type DA. Ces étoiles forment environ 75% de la population totale des naines blanches. D'autres raies peuvent dominer le spectre, comme celles de l'hélium ionisé (DO), de l'hélium neutre (DB), du carbone (DQ) ou de différents éléments lourds (DZ). Si l'étoile naine blanche est assez froide pour que tous les éléments soient dans leur état fondamental, le spectre ne montre qu'une distribution continue du flux (DC).

Dans ce mémoire, nous nous intéresserons aux profils d'absorption des raies de l'hélium neutre, qui sont visibles principalement dans les naines blanches de type DB, et dans une moindre mesure dans les étoiles de type DO. Des spectres représentatifs de DB et de DO sont illustrés à la figure 1.1 en fonction de la température effective. À très haute température ( $T_{\text{eff}} \sim 100,000$  K), le spectre est presque continu parce que la matière est complètement ionisée. Le spectre est également continu à basse température ( $T_{\text{eff}} \sim 12,000$  K), mais cette fois-ci parce que l'hélium est dans son état fondamental. C'est dans le régime intermédiaire de températures que les raies d'hélium neutre sont les plus importantes, soit dans l'intervalle  $15,000 \text{ K} \lesssim T_{\text{eff}} \lesssim 45,000 \text{ K}$ .

Il existe deux grandes méthodes — les techniques dites photométrique et spectroscopique — qui permettent de mesurer les paramètres physiques des étoiles naines blanches, notamment la température effective, la masse, et la composition chimique. La technique



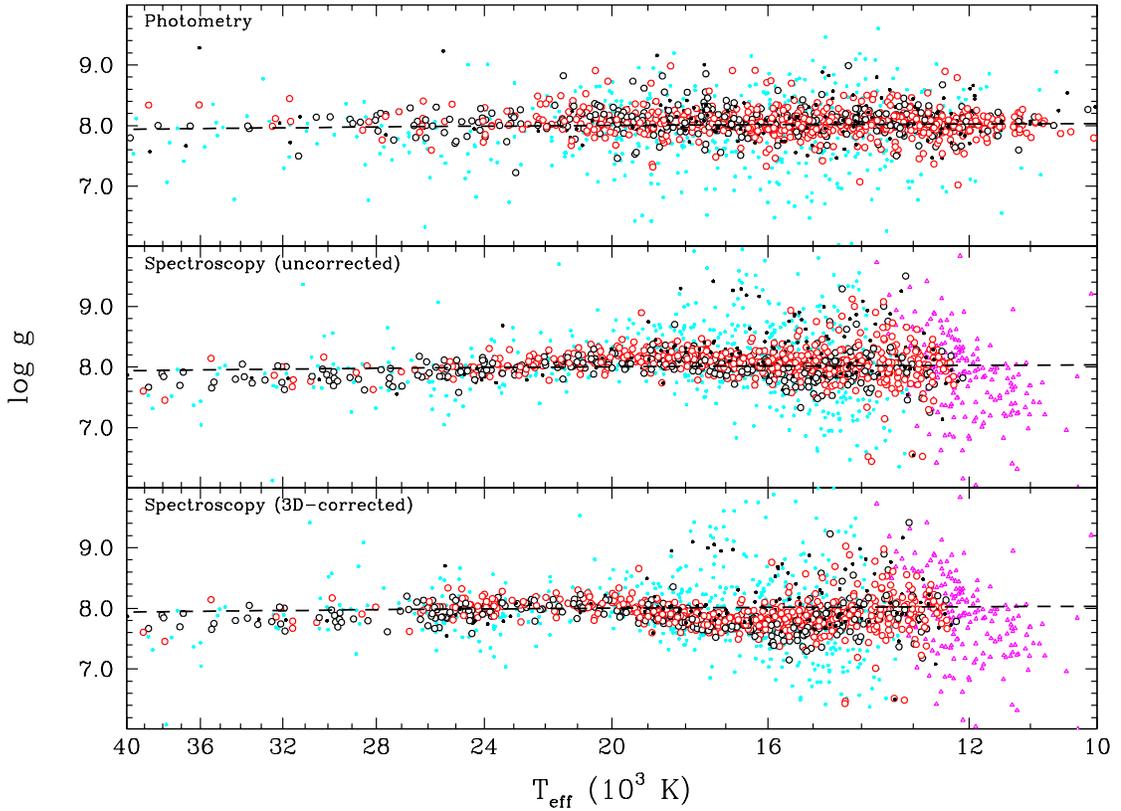
**Fig. 1.1.** Spectres d'étoiles naines blanches de type DO et DB en fonction de la température effective, indiquée à la droite de chaque spectre. Les lignes pointillées indiquent les raies He I  $\lambda 4471$  et He II  $\lambda 4686$  qui permettent de bien identifier la transition entre les deux types de naines blanches.

photométrique repose sur l'usage de magnitudes qui mesurent le flux moyen de l'étoile sur une certaine bande passante (Bergeron et al., 1997, 2001). Des mesures sur plusieurs bandes passantes permettent ainsi de définir la distribution d'énergie spectrale de l'étoile, qui peut ensuite être comparée avec celles prédites à partir de calculs de modèles d'atmosphère. Ici les

paramètres libres ajustés par une méthode de moindres carrés sont la température effective de l'étoile,  $T_{\text{eff}}$ , et l'angle solide qu'elle sous-tend,  $\pi(R/D)^2$ , où  $R$  est le rayon de l'étoile et  $D$  sa distance à la Terre. La distance est déterminée à partir de mesures de la parallaxe trigonométrique dont les plus récentes proviennent de la mission *Gaia* (Gaia Collaboration et al., 2018a). Le rayon peut ensuite être converti en masse de l'étoile,  $M$ , en utilisant la relation masse-rayon pour les étoiles naines blanches. Une bonne modélisation de la distribution d'énergie repose sur la compréhension des diverses sources d'opacités, qui dépendent des différentes conditions physiques à la photosphère de la naine blanche. Puisque chaque magnitude représente une moyenne du flux sur une large bande passante, seule l'information des opacités les plus importantes sera échantillonnée dans cet intervalle de longueurs d'onde.

La technique spectroscopique, quant à elle, repose sur une comparaison détaillée des profils des raies spectrales. Cette technique fut élaborée par Bergeron et al. (1992) dans le contexte des naines blanches de type DA, et plus tard adaptée pour les étoiles DB par Beauchamp et al. (1996, voir aussi Eisenstein et al. 2006a, Voss et al. 2007, Bergeron et al. 2011, pour ne citer que quelques études). Les paramètres libres ajustés dans ce cas sont la température effective ( $T_{\text{eff}}$ ) et la gravité de surface ( $\log g$ ). Ici encore, la masse peut être obtenue à partir de la relation masse-rayon. Bien que plus précise que l'approche photométrique, cette technique requiert la modélisation à la fois des processus d'élargissement des raies spectrales et des opacités du continu afin d'extraire les propriétés physiques.

En principe, les paramètres obtenus à partir des techniques photométrique et spectroscopique devraient être similaires pour une étoile donnée. Genest-Beaulieu & Bergeron (2019b) ont effectué une telle comparaison des paramètres physiques photométriques et spectroscopiques en utilisant le large échantillon d'étoiles naines blanches de type DA et DB du *Sloan Digital Sky Survey* (SDSS). Les auteurs ont démontré qu'il existe des différences significatives entre ces paramètres — notamment en température effective et en masse — qui varient en fonction du type spectral et du régime de température considérés. Dans le contexte de notre étude, nous montrons à la figure 1.2 une comparaison entre les valeurs de  $\log g$  obtenues des deux méthodes pour les naines blanches de type DB. Cette figure est tirée d'une étude plus approfondie de l'échantillon d'étoiles DB du SDSS par Genest-Beaulieu & Bergeron (2019a, voir leur figure 7). Le panneau du haut de cette figure montre que les valeurs de  $\log g$  photométriques forment une distribution uniforme autour d'une masse moyenne de 0.6



**Fig. 1.2.** Distribution des gravités de surface mesurées à l’aide des techniques photométriques (haut) et spectroscopiques (centre) en fonction de la température effective (figure tirée de Genest-Beaulieu & Bergeron 2019a). Les cercles noirs et rouges correspondent respectivement aux étoiles de type DB et DBA (une DBA montre également des raies d’hydrogène). Tous les autres points dans cette figure correspondent à des mesures plus incertaines (voir la description plus détaillée de la figure 7 de Genest-Beaulieu et al.). Le graphique du bas est identique à celui du centre, mais en incluant les corrections hydrodynamiques 3D. Dans tous les graphiques, la ligne en tirets représente une séquence évolutive à  $0.6 M_{\odot}$ .

$M_{\odot}$ . C’est le résultat auquel on s’attend du point de vue évolutif. Par contraste, les valeurs de  $\log g$  spectroscopiques dans le panneau du milieu montrent des déviations importantes autour de cette masse moyenne en fonction de la température effective. Genest-Beaulieu

et al. en concluent donc que le problème réside dans la méthode spectroscopique, et plus particulièrement dans le calcul des modèles d’atmosphère riches en hélium.

La situation est également exacerbée par le fait qu’en dessous de  $T_{\text{eff}} \sim 30,000$  K, l’enveloppe et l’atmosphère stellaires des étoiles naines blanches de type DB deviennent convectives. Le transport d’énergie par convection doit donc être pris en compte dans le calcul des modèles d’atmosphère et des spectres synthétiques. La présence de la convection affecte davantage la technique spectroscopique que l’approche photométrique. Malheureusement, la convection est un phénomène complexe à traiter puisqu’il s’agit d’une instabilité hydrodynamique tri-dimensionnelle. Il est toutefois possible de simplifier son traitement à l’aide de la théorie de la longueur de mélange (*mixing-length theory* ou MLT), telle qu’élaborée par Prandtl (1925) et décrite par exemple dans Mihalas (1978). Dans le cadre de la MLT, le traitement de la convection se réduit à un problème en une seule dimension. Dans le contexte particulier des étoiles naines blanches, l’efficacité du transport d’énergie par convection est paramétrée par les versions dites ML1, ML2 et ML3, où l’efficacité augmente graduellement de ML1 à ML3 (voir Fontaine et al. 1981 pour les détails). Il a toutefois été démontré que l’utilisation de la MLT dans le contexte des naines blanches de type DA donnait lieu à des valeurs de  $\log g$  mesurées par la méthode spectroscopique trop élevées à basse température ( $T_{\text{eff}} \lesssim 12,000$  K; Bergeron et al. 1992, voir aussi Eisenstein et al. 2006b et Gianninas et al. 2011). La solution à ce fameux “*high log g problem*” fut apportée par Tremblay et al. (2011b, voir aussi Tremblay et al. 2013), qui démontrèrent que des calculs de simulations hydrodynamiques tri-dimensionnelles (3D) réduisaient les valeurs de  $\log g$  spectroscopiques de façon significative. Malheureusement, des modèles hydrodynamiques similaires dans le contexte des naines blanches de type DB (Cukanovaite et al., 2018) n’ont pas eu autant de succès, comme en témoigne le panneau du bas de la figure 1.2, où les facteurs de correction 3D appliqués aux solutions spectroscopiques 1D (panneau du centre) donnent lieu à de nouveaux problèmes, particulièrement en dessous de  $T_{\text{eff}} \lesssim 20,000$  K, où les valeurs de  $\log g$  spectroscopiques semblent maintenant sous-estimées.

Dans le but d’améliorer la cohérence interne entre les paramètres des naines blanches de type DB mesurés par les deux techniques photométrique et spectroscopique, nous nous attaquerons dans ce mémoire à un des ingrédients essentiels de la technique spectroscopique, soit celui du calcul des profils d’élargissement Stark des raies d’hélium neutre, sur lequel

repose entièrement la détermination des paramètres atmosphériques,  $T_{\text{eff}}$  et  $\log g$ . Dans les naines blanches de type DB, il existe en fait deux régimes de température relativement distincts, dominés par des processus d'élargissement différents. Le premier se produit à des températures effectives plus basses que  $T_{\text{eff}} \sim 15,000$  K, où l'élargissement du type van der Waals domine, alors qu'à plus hautes températures, c'est plutôt l'élargissement Stark qui contribue davantage. Ces deux types d'élargissement spectral sont des sujets extrêmement complexes à traiter en soi, et nous ne considérerons que l'élargissement Stark dans cette étude.

Le traitement actuel des raies d'hélium neutre pour le calcul de spectres synthétiques de naines blanches de type DB est décrit par la théorie standard de l'élargissement Stark (Baranger, 1958a,b,c; Griem et al., 1962; Barnard et al., 1969), tel qu'implémenté par Beauchamp (1995) et Beauchamp et al. (1997). Cette théorie semi-analytique repose sur des traitements approximatifs quant aux ions et aux électrons présents dans l'atmosphère de l'étoile. Plusieurs des approximations faites dans le cadre de cette théorie ne sont toutefois pas nécessairement valides dans certains régimes de densité et de température. Parmi ces approximations, il y a la considération d'ions fixes dans l'espace (approche quasi-statique), partiellement justifiée à cause de la faible vitesse des ions comparativement à celles des électrons. Il y a également l'approximation d'impact ainsi que le *one-electron approximation*, utilisées pour décrire respectivement la contribution des électrons dans le coeur et dans les ailes de la raie (Baranger, 1962; Griem, 1974). Même si ces approximations permettent un traitement simple et rapide de l'élargissement Stark, une approche plus détaillée est nécessaire pour avoir une meilleure représentation des profils d'absorption dans les conditions physiques rencontrées dans les atmosphères des étoiles naines blanches.

L'approche que nous adopterons dans notre étude est celle de la simulation numérique. Cette dernière, introduite par Stamm & Voslamber (1979) pour traiter la contribution du mouvement des ions à l'élargissement spectral, repose sur la génération de plusieurs séquences temporelles de champs électriques, produits par des particules en mouvement dans un volume fini. Ces champs électriques perturbent les niveaux d'énergie de l'atome émetteur de façon unique pour chaque étape de la séquence temporelle. Cette méthode de résolution se rapproche de la situation réaliste la plus idéale. Ses deux plus grandes faiblesses demeurent toutefois le traitement du volume fini de l'espace numérique ainsi que le temps de calcul

requis. Le traitement de l'élargissement Stark par simulations numériques n'était pas envisageable avant les améliorations apportées par Gigoso et al. (1985) et Gigoso & Cardenoso (1987). Par exemple, Gigoso & Cardenoso ont introduit, pour l'atome d'hydrogène, une méthode réduisant le temps de calcul de façon significative en plus de proposer une technique permettant de bien traiter les conditions frontières d'un volume de simulation fini. Hegerfeldt & Kesting (1988) ont également élaboré une méthode afin de traiter un volume fini de simulation adéquat sans réinjecter de particules dans la simulation, mais au prix d'un temps de calcul plus important. À partir de ce point, de nombreuses améliorations ont été apportées aux techniques de simulation (Calisti et al., 1988; Frerichs, 1989; Poquérusse et al., 1996; Halenka & Olchawa, 1996; Alexiou et al., 1999a,b; Sorge & Günter, 2000; Olchawa, 2002; Wujec et al., 2002; Halenka et al., 2002; Wujec et al., 2003; Olchawa et al., 2004; Gigoso et al., 2018) permettant ainsi de produire des profils d'élargissement Stark aussi bien pour les raies d'hydrogène (Gigoso & Cardenoso, 1996; Gigoso et al., 2003; Gomez, 2017) que pour les raies d'hélium (Gigoso & González, 2009; Lara et al., 2012).

Le but de notre étude est de concevoir un environnement de simulation pour le calcul de profils d'élargissement Stark des raies d'hélium neutre dans les conditions physiques régnant dans les atmosphères des étoiles naines blanches de type DB. Nous commencerons au chapitre 2 par décrire la modélisation des profils de raies ainsi que les différents types d'élargissements, en se concentrant sur l'effet Stark avec un champ électrique fixe, qui est le processus dominant dans les atmosphères de naines blanches de type DB chaudes ( $T_{\text{eff}} \gtrsim 15,000$  K). Le chapitre 3 sera consacré au traitement numérique d'un champ électrique variable, engendré par la dynamique des particules dans l'environnement de l'atome émetteur. Le chapitre 4 décrira en détails les différentes méthodes de distributions des perturbateurs dans un volume de simulation, en introduisant les aspects explorés par Hegerfeldt & Kesting (1988) et Gigoso & Cardenoso (1996). Nous poursuivrons au chapitre 5 par une application de nos calculs au cas où les particules dans l'environnement sont fixes, dans le but de valider les procédures numériques requises pour produire le profil Stark, c'est-à-dire la recherche des valeurs propres et le calcul de la transformée de Fourier. Nous étudierons par la suite au chapitre 6 les difficultés inhérentes au traitement dynamique de la simulation à l'aide des résultats bruts des simulations numériques, sans aucun traitement. Nous terminerons par la présentation au chapitre 7 des résultats de nos simulations pour le calcul de profils d'élargissement Stark

des raies d'hélium neutre sous la forme d'un article qui sera éventuellement soumis à *The Astrophysical Journal*.

## 1.1. Déclaration de l'étudiant

Ce mémoire est le résultat d'un projet initialement proposé par Pierre Bergeron et Alain Beauchamp. Ce projet consiste à explorer les différentes sources d'opacités présentes dans le code de modèles d'atmosphère et de mettre à niveau celles pouvant expliquer des différences observables entre certains spectres observés et nos spectres synthétiques. Le choix a été fait de se concentrer sur les profils des raies d'hélium neutre. Pour améliorer le calcul des profils d'élargissement Stark de Beauchamp et al. (1997), mon choix s'est arrêté sur la production de simulations numériques à l'échelle atomique. Puisque l'environnement de calcul de telles simulations n'avait jamais été élaboré dans le groupe de recherche sur les étoiles naines blanches de l'Université de Montréal, nous avons établi une série d'étapes intermédiaires menant à l'élaboration d'un environnement complet de simulations. Cela m'a permis de m'assurer de la cohérence physique et de la validité des outils numériques utilisés dans ces simulations.

J'ai conçu le code informatique complet permettant de calculer les profils Stark, en n'ayant comme référence que certains articles décrivant approximativement l'approche à suivre pour la production de simulations numériques. J'ai produit un modèle afin de décrire la position des particules, ainsi que le volume dans lequel elles se trouvent, en m'inspirant de la méthode de Hegerfeldt & Kesting (1988) et Gigoso & Cardenoso (1987). Avant d'arriver au produit final, je me suis fait un modèle de référence simple, n'utilisant que des coordonnées cartésiennes afin de décrire l'isotropie du milieu et le respect de la distribution de champ électrique. Chaque étape de la construction de la simulation était comparée au modèle de référence afin de m'assurer de sa bonne implémentation. Un procédé similaire a été employé pour l'évolution temporelle du champ électrique, le calcul de l'opérateur d'évolution temporelle, la résolution de la transformée de Fourier numérique et la technique de lissage des profils Stark.

J'ai aussi dû ajuster et généraliser certains concepts présentés dans la thèse de doctorat d'Alain Beauchamp afin de les adapter à la simulation numérique. Je dois l'algorithme calculant les éléments de matrice dipolaire à Alain Beauchamp (élaboré dans le cadre de

son doctorat et expliqué à la section 2.4 du mémoire), me permettant ainsi de produire des profils de raie d'hélium qui montrent des différences avec ceux utilisés précédemment dans la communauté scientifique.

Dans ces pages se retrouve l'ensemble de ma démarche, de ma compréhension et de mes résultats concernant la simulation numérique et les profils de raies de l'atome d'hélium. Mes résultats sont aussi comparés avec les profils de raies produits par le groupe de recherche de Gigoso, disponibles dans le domaine public.

# Chapitre 2

---

## Caractérisation des raies du spectre électromagnétique

Le spectre électromagnétique des étoiles naines blanches présente des raies d'absorption très larges autour des énergies de transitions électroniques des atomes et ions présents dans l'atmosphère. Dans ce chapitre, les différents types d'élargissement seront présentés. Par la suite, celui qui domine dans le spectre de ces étoiles sera élaboré plus en détail.

### 2.1. Calcul de l'opacité monochromatique

Le calcul d'un spectre synthétique nécessite la résolution de l'équation de transfert radiatif

$$\mu \frac{\partial I_\nu}{\partial z} = -\chi_\nu I_\nu + \eta_\nu, \quad (2.1.1)$$

avec  $\mu = \cos \theta$  où  $\theta$  est l'angle entre la normale à la surface et la direction de propagation du faisceau,  $I_\nu$  est l'intensité monochromatique,  $\chi_\nu$  est le coefficient d'extinction et  $\eta_\nu$  est le coefficient d'émissivité. Ce coefficient d'extinction est défini à l'équilibre thermodynamique local comme

$$\chi_\nu = \left[ \sum_{i,j} N_{i,j} \sum_{l>i} \alpha_{il}(\nu) + \sum_{i,j} N_{i,j} \alpha_{i\kappa}(\nu) + \sum_{\kappa} N_e N_\kappa \alpha_{\kappa\kappa}(\nu, T) \right] \left( 1 - e^{-h\nu/kT} \right) + \sum_d N_d \sigma_d(\nu), \quad (2.1.2)$$

où  $\alpha_{il}$  est la section efficace du processus de photoexcitation,  $\alpha_{i\kappa}$  la section efficace du processus de photoionisation,  $\alpha_{\kappa\kappa}$  celle de l'absorption libre-libre et  $\sigma_d$  la section efficace de la diffusion du faisceau. Les  $N_{i,j}$  sont les densités en nombre de particules dans un état d'ionisation  $j$  et un état d'excitation  $i$ , alors que  $N_e$  et  $N_\kappa$  sont respectivement les densités en nombre des électrons et des ions  $\kappa$  associés (Mihalas 1978). Les trois premières sommes sont

corrigées par le terme  $(1 - e^{-h\nu/kT})$ , qui représente le facteur de correction pour l'émission stimulée.

Cette équation peut être divisée en deux contributions distinctes, soit celles des raies et du continu. Pour une raie produite par la transition d'un électron associé à une particule, sa contribution au coefficient d'extinction est donnée par

$$\chi_\nu^{\text{raie}} = N_i \alpha_{ij}(\nu) (1 - e^{-h\nu/kT}), \quad (2.1.3)$$

où  $N_i$  est la population du niveau d'énergie inférieur  $i$  et

$$\alpha_{ij}(\nu) = \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{ij} F(\nu). \quad (2.1.4)$$

Le terme  $f_{ij}$  représente la force d'oscillateur de la transition entre les niveaux inférieur  $i$  et supérieur  $j$ , et  $F(\nu)$  est le profil de raie normalisé à l'unité.

Afin de bien décrire le profil de raie produit dans un environnement, il est important de bien représenter physiquement les processus d'élargissement d'importance.

## 2.2. Les processus d'élargissement

Le processus d'élargissement de base qui affecte toutes les raies du spectre électromagnétique est l'élargissement naturel. Il est causé par le fait qu'un émetteur ne peut rester dans un état excité que pendant un temps fini. Ce temps caractéristique peut être extrêmement long pour certains niveaux (de l'ordre de la nanoseconde ou de la microseconde). L'élargissement produit par ce processus est décrit par le principe d'incertitude de temps-énergie d'Heisenberg (Fox, 2006)

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar$$

$$\Delta \omega = \frac{\Delta E}{\hbar} \implies \Delta \omega \geq \frac{1}{\Delta t}.$$

L'équation ci-dessus démontre que, plus le temps de vie du niveau ( $\Delta t$ ) est long, plus la largeur de la raie ( $\Delta\omega$ ) est étroite. Ce processus d'élargissement naturel est toujours négligeable dans les spectres de naines blanches comparativement aux autres types d'élargissements, mais il permet d'illustrer qu'aucune transition électronique ne peut se produire à une énergie précise en raison du principe d'incertitude de temps-énergie.

Un autre processus d'élargissement possible est celui causé par l'effet Doppler. Ce dernier est dû au fait que les émetteurs dans le gaz possèdent des vitesses suivant la distribution de Maxwell-Boltzmann des vitesses dans des orientations aléatoires par rapport à l'observateur. Son effet sur le profil de raie est décrit par une convolution avec une gaussienne dont la largeur à mi-hauteur (FWHM) ( $\Delta\omega$ ) est fonction de la température de l'environnement de l'émetteur (qui est l'atome d'hélium dans le cas présent)

$$\Delta\omega = 2\omega_0 \left( \frac{2 \ln 2kT}{m_{\text{He}}} \right)^{1/2}, \quad (2.2.1)$$

où  $\omega_0$  est la fréquence de transition de l'atome d'hélium dans son référentiel au repos et  $m_{\text{He}}$  est la masse de l'hélium. Cette équation démontre que l'élargissement d'une raie n'est pas uniquement causé par les propriétés des particules mais aussi par leur environnement. L'élargissement Doppler devient plus important lorsque la température du milieu est élevée, puisqu'il dépend de la vitesse thermique des émetteurs.

Dans un milieu dense et chaud, tel celui de l'atmosphère d'une naine blanche, le type d'élargissement le plus important est celui par pression. Cette appellation générale couvre l'ensemble des élargissements produits par une interaction entre un émetteur et les autres particules du plasma. Dans le cas des étoiles naines blanches suffisamment chaudes pour que leur atmosphère soit surtout constituée de particules chargées, l'élargissement Stark dominera. Quand la naine blanche se refroidit, les électrons présents dans l'atmosphère se recombinent aux ions, ce qui a pour effet d'augmenter la proportion de particules neutres, réduisant ainsi l'importance de l'élargissement Stark. Cette augmentation de particules neutres dans le milieu laisse place à l'élargissement du type van der Waals, régi par le potentiel électrique produit par les particules neutres. Afin de bien décrire l'effet de ces interactions sur le profil de raie, soit par l'effet Stark et van der Waals, l'aspect quantique de la production du profil et la variation des niveaux d'énergies doivent être traités. Puisque

ces deux types d'interactions sont de vastes sujets à considérer, nous nous concentrons sur l'élargissement Stark plus particulièrement.

### 2.3. Étude quantique de l'élargissement Stark

Pour les naines blanches de type DB avec une température effective entre  $T_{\text{eff}} \sim 12,000$  K et  $30,000$  K, leurs spectres montrent des raies d'absorption produites par des transitions de l'atome d'hélium. Puisque des particules neutres et ionisées composent leur atmosphère, le plasma qu'elles forment est partiellement ionisé, mais les étoiles naines blanches demeurent électriquement neutres dans leur ensemble. Toutefois, à plus petite échelle, la distribution spatiale d'ions et d'électrons produit des champs électriques non nuls, appelés microchamps. Ces microchamps ont pour effet de perturber les niveaux d'énergie des ions et atomes présents dans l'atmosphère, produisant ainsi un élargissement du profil de la raie spectrale. La variation des niveaux d'énergie dépend de l'intensité du champ électrique local qui varie dans le temps. Il s'agit de l'effet Stark.

Le profil de raie élargi par l'effet Stark résulte d'un comportement statistique de plusieurs émetteurs. Par contre, il est plus simple de traiter un seul émetteur à la fois, et de faire une moyenne sur toutes les configurations spatiales possibles de perturbateurs. Cet émetteur est influencé par les perturbateurs qui contribuent à l'élargissement du profil de raie. L'émetteur et les perturbateurs peuvent être considérés comme un système quantique à part entière, qui possède ses propres niveaux d'énergie et états stationnaires (Baranger, 1962; Griem, 1974). Ainsi, nous pouvons exprimer le spectre de puissance de l'émission spontanée produit à la fréquence  $\omega$  de la manière suivante (Baranger, 1962; Smith et al., 1969)

$$\begin{aligned} P(\omega) &= \frac{4\pi\omega^4}{3c^3} \sum_{if} \delta(\omega - \omega_{if}) |\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2 \rho_i, \\ &= \frac{4\pi\omega^4}{3c^3} F(\omega), \end{aligned} \tag{2.3.1}$$

où  $\omega_{if}$  est la fréquence angulaire du photon émis pour la transition entre l'état initial  $i$  et l'état final  $f$  du système complet,  $c$  est la vitesse de la lumière,  $\rho_i$  est la valeur de l'élément de la matrice densité pour l'état  $i$  et  $\mathbf{d}$  est l'opérateur de moment dipolaire du système complet. La forme du profil d'émission spontanée est définie par  $F(\omega)$  parce que le terme devant la

somme dans l'équation 2.3.1 est presque constant pour une raie (Baranger, 1962; Griem, 1974)

$$F(\omega) = \sum_{if} \delta(\omega - \omega_{if}) |\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2 \rho_i, \quad (2.3.2)$$

Cette équation est le fondement du calcul du profil Stark, en particulier dans l'approximation semi-classique où l'atome quantique est perturbé par un champ électrique produit par des perturbateurs classiques. Il est maintenant nécessaire de caractériser correctement les états stationnaires d'un atome perturbé.

Considérons d'abord le cas d'un atome d'hydrogène non perturbé. La description de son électron, qui est la seule composante caractérisant les transitions, par rapport au noyau de l'atome représente un état stationnaire. L'électron est décrit par quatre nombres quantiques, soit  $n$ ,  $\ell$ ,  $m$  et  $s$  (Griffiths, 2017). Le nombre quantique  $n$  est le niveau d'énergie où se trouve l'électron et il s'agit d'un nombre entier positif. Le nombre quantique  $\ell$  caractérise le moment orbital de l'électron et il est un entier entre 0 et  $n - 1$ . Le nombre quantique  $m$  décrit la projection du moment orbital sur un axe discret donné et est défini comme un entier entre  $-\ell$  et  $\ell$ . Le nombre quantique  $s$  représente pour sa part le spin de l'électron. Il peut prendre deux valeurs, soit  $\pm 1/2$ . Chaque combinaison distincte de ces quatre nombres représente un niveau d'énergie spécifique lorsque l'atome en question est non perturbé (isolé)<sup>1</sup>. Ces quatre nombres quantiques décrivent ce qui est appelé un état quantique. Dans ce cas particulier, il s'agira de celui de l'électron de l'émetteur isolé. Ces états quantiques de l'électron satisfont l'équation de Schrödinger suivante

$$H_0 |n \ell m s\rangle = E_{n\ell s} |n \ell m s\rangle, \quad (2.3.3)$$

où  $H_0$  et  $E_{n\ell s} = \hbar\omega_{n\ell s}$  sont respectivement l'hamiltonien non perturbé de l'atome et l'énergie des états associés aux nombres quantiques  $n$ ,  $\ell$  et  $s$ . Le terme  $H_0$  agit comme un opérateur sur l'état  $|n \ell m s\rangle$ . Le rôle d'un opérateur est d'extraire de l'information d'un état ou de le transformer. En particulier, l'hamiltonien extrait l'information concernant l'énergie de l'état stationnaire.

---

<sup>1</sup>Pour la majorité des atomes (l'exception étant l'hydrogène), cette énergie dépend des nombres quantiques  $n$ ,  $\ell$  et  $s$ , puisque le nombre quantique  $m$  n'est qu'une simple projection du nombre quantique  $\ell$  sur un axe spécifique.

Dans le cas de l'hélium, il y a deux électrons à décrire et non un seul comme l'hydrogène. Pour les raies du visible (qui seront celles considérées dans notre étude), un des deux électrons demeure au niveau fondamental alors que l'autre effectue la transition. Ce dernier ne subit qu'une charge effective réduite, regroupant celle de l'atome et de l'électron du fondamental, résultant de la grande différence d'énergie entre les deux électrons. En effet, le niveau fondamental est à une énergie d'excitation de 0 eV alors que tous les niveaux impliqués dans les transitions du visible (inférieurs et supérieurs) sont à une énergie plus grande que 19 eV (voir la figure 2.1). L'atome d'hélium peut alors être représenté par un atome dit hydrogénoïde pour lequel seule la description de l'électron de transition est nécessaire pour les états stationnaires si la transition est dans le visible. Cela implique que l'équation 2.3.3 peut aussi être utilisée pour l'atome d'hélium isolé.

Même s'il est maintenant possible de décrire les états stationnaires pour l'hélium neutre isolé, la situation considérée n'est pas aussi triviale que celle présentée par l'équation 2.3.3 puisque l'atome est perturbé par son environnement. Il ne s'agit alors plus d'un atome d'hélium isolé, mais plutôt d'un système quantique hydrogénoïde regroupant l'influence des perturbateurs présents dans l'environnement. En appliquant l'hamiltonien perturbé  $H$  — pour un champ électrique constant — sur un état stationnaire de ce système, nous obtenons

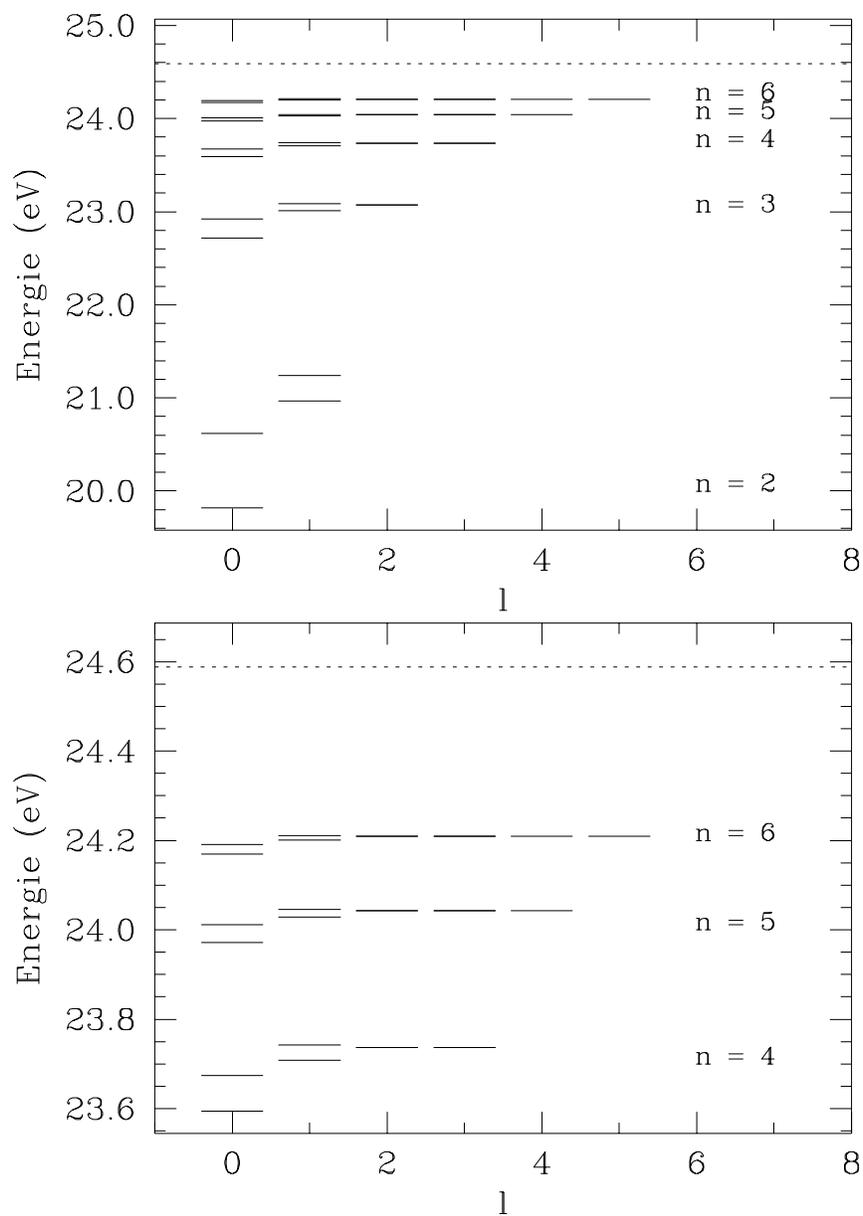
$$H|\alpha(\boldsymbol{\beta})\rangle = (H_0 + \mathbf{F} \cdot \mathbf{d})|\alpha(\boldsymbol{\beta})\rangle = \hbar\omega_\alpha|\alpha(\boldsymbol{\beta})\rangle, \quad (2.3.4)$$

où  $\mathbf{F}$  est le vecteur champ électrique,  $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{F}/F_0$  est le vecteur du champ électrique  $\mathbf{F}$  normalisé par le champ de Holtsmark

$$F_0 = 2\pi \left( \frac{4}{15} \right)^{2/3} |Z| e n_p^{2/3}, \quad (2.3.5)$$

où  $e$  est la charge élémentaire et  $n_p$  est la densité spatiale de la particule  $p$ . Aussi, l'état  $|\alpha(\boldsymbol{\beta})\rangle$  est celui de l'hélium perturbé et  $\mathbf{d}$  est l'opérateur de moment dipolaire de l'électron de l'émetteur.

L'équation 2.3.4 permet d'illustrer le problème qu'apporte la considération d'une perturbation au système. Il n'y a aucune information explicite sur les nombres quantiques caractérisant les états stationnaires perturbés. Toutefois, les états stationnaires liés et du continu de l'atome non perturbé sont connus et forment un ensemble complet. Les états



**Fig. 2.1.** Représentation des niveaux d'énergie de l'atome d'hélium caractérisés par les nombres quantiques  $n$  et  $l$  (figure tirée de Beauchamp, 1995). Pour chaque nombre quantique  $l$  d'un nombre  $n$  donné, il y a deux niveaux d'énergie caractérisés par le nombre quantique  $s$ . Cette différence d'énergie n'est pas visible sur la figure pour des états ayant un nombre quantique  $l$  plus grand que 1. L'énergie du niveau fondamental a été fixée à 0 eV. La figure du bas est un agrandissement d'une portion de la figure supérieure.

perturbés peuvent donc s'exprimer par une expansion dans la base des états non perturbés de l'atome d'hélium

$$|\alpha(\boldsymbol{\beta})\rangle = \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{\ell'=0}^{n'-1} \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} C_{\ell'\alpha}^{m'm'}(\boldsymbol{\beta}) |n' \ell' m' s\rangle + \sum_{\ell'} \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} \int_0^{\infty} dE C_{\ell'\alpha}^{Em'}(\boldsymbol{\beta}) |E \ell' m' s\rangle, \quad (2.3.6)$$

où  $C_{\ell'\alpha}^{n'm'}(\boldsymbol{\beta})$  sont les coefficients de changement de base. L'intégrale représente la contribution des niveaux d'énergie  $E$  du continu de l'émetteur. Il n'y a pas de sommation sur le nombre quantique  $s$  puisque le spin est le même dans les deux bases (il n'est pas affecté par le potentiel). Le premier terme représente les états liés non perturbés et le deuxième les états du continu. L'état stationnaire  $|\alpha(\boldsymbol{\beta})\rangle$  rend l'équation 2.3.4 très lourde numériquement, puisque la base des états non perturbés comprend un nombre infini d'éléments. Cette définition peut être simplifiée en considérant que le champ électrique produit par les perturbateurs engendre seulement une petite déviation d'énergie. Celle-ci n'est pas assez grande pour que les états du continu et les états liés avec un nombre quantique principal autre que celui de l'état non perturbé contribuent de manière significative à la sommation 2.3.6. Il est alors permis d'écrire

$$|\alpha(\boldsymbol{\beta})\rangle \sim \sum_{\ell'=0}^{n-1} \sum_{m'=-\ell'}^{\ell'} C_{\ell'\alpha}^{m'}(\boldsymbol{\beta}) |n \ell' m' s\rangle, \quad (2.3.7)$$

où le nombre quantique  $n$  est celui du niveau non perturbé vers lequel converge l'état perturbé lorsque l'intensité du champ électrique tend vers 0. Aussi, les coefficients  $C_{\ell'\alpha}^{m'}$  sont contraints par le produit scalaire suivant, qui est la contrainte de normalisation

$$\begin{aligned} \langle \alpha(\boldsymbol{\beta}) | \alpha(\boldsymbol{\beta}) \rangle &= \sum_{\ell', \ell''} \sum_{m', m''} C_{\ell'\alpha}^{m'*}(\boldsymbol{\beta}) C_{\ell''\alpha}^{m''}(\boldsymbol{\beta}) \langle n \ell' m' s | n \ell'' m'' s \rangle \\ &= \sum_{\ell', \ell''} \sum_{m', m''} |C_{\ell'\alpha}^{m'}(\boldsymbol{\beta})|^2 \delta_{\ell'\ell''} \delta_{m'm''} \\ &= \sum_{\ell'} \sum_{m'} |C_{\ell'\alpha}^{m'}(\boldsymbol{\beta})|^2 \\ &= 1. \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

Avec ce changement de base, les équations 2.3.4 et 2.3.7 peuvent être combinées afin de décrire les énergies des états stationnaires de l'hélium perturbé ainsi que les coefficients  $C_{\ell'\alpha}^{m'}(\boldsymbol{\beta})$  associés

$$\sum_{\ell'} \sum_{m'} C_{\ell'\alpha}^{m'}(\hbar\omega_{n\ell's} + \mathbf{F} \cdot \mathbf{d})|n \ell' m' s\rangle = \sum_{\ell'} \sum_{m'} C_{\ell'\alpha}^{m'}(\hbar\omega_{\alpha})|n \ell' m' s\rangle, \quad (2.3.9)$$

ce qui permettra la description de l'élargissement Stark. Cette équation se transforme en un problème de recherche de valeurs propres et de vecteurs propres — soit les énergies de l'hélium perturbé et les coefficients  $C_{\ell'\alpha}^{m'}(\boldsymbol{\beta})$ , respectivement — en la multipliant par  $\langle n \ell m s |$  où  $\ell$  et  $m$  peuvent être différents de  $\ell'$  et  $m'$  (Beauchamp, 1995)

$$\sum_{\ell'} \sum_{m'} [\Omega_{\ell'\ell}^{m'm}(\boldsymbol{\beta}) - \omega_{\alpha}(\boldsymbol{\beta})\delta_{\ell'\ell}\delta_{m'm}] C_{\ell'\alpha}^{m'} = 0, \quad (2.3.10)$$

avec  $\Omega_{\ell'\ell}^{m'm}(\boldsymbol{\beta})$  donné par

$$\Omega_{\ell'\ell}^{m'm} \equiv \begin{cases} \frac{1}{\hbar} \langle n \ell m s | \mathbf{F} \cdot \mathbf{d} | n \ell' m' s \rangle & \text{si } |\ell - \ell'| = 1 \text{ et } |m - m'| \leq 1 \\ \omega_{n\ell s} & \text{si } |\ell - \ell'| = 0 \text{ et } |m - m'| = 0 \\ 0 & \text{si } |\ell - \ell'| > 1 \text{ ou } |m - m'| > 1, \end{cases} \quad (2.3.11)$$

où le grand nombre d'éléments nuls est une conséquence des règles de sélection qui seront discutées à la section suivante.

En regroupant l'ensemble des  $\Omega_{\ell'\ell}^{m'm}$  dans une matrice carrée et hermitienne, un système d'équations peut être formé sous forme matricielle

$$[\Omega - \omega_{\alpha}(\boldsymbol{\beta})I] \mathbf{C}_{\alpha} = 0. \quad (2.3.12)$$

Cette équation possède deux groupes de solutions, soit une triviale où le vecteur  $\mathbf{C}_{\alpha}$  est nul et une non triviale pour laquelle le déterminant de la matrice multipliant le vecteur  $\mathbf{C}_{\alpha}$  est nul. Ainsi, en résolvant l'équation 2.3.12 pour que le déterminant de la matrice soit nul, on trouve les énergies  $\hbar\omega_{\alpha}$  associées à la transition considérée. En réinsérant les solutions dans l'équation 2.3.12, les coefficients de changement de base de l'atome d'hélium hydrogénoïde non perturbé peuvent être calculés. Avant de procéder, il est nécessaire de correctement décrire le cas où  $|\ell - \ell'| = 1$  de l'équation 2.3.11 pour connaître les niveaux d'énergies perturbés.

## 2.4. Les éléments de matrice dipolaire de l'atome d'hélium

Dans la définition de la valeur de  $\Omega_{\ell'\ell}^{m'm}$  de l'équation 2.3.11, le cas où  $|\ell - \ell'| = 1$  nécessite un calcul particulier. C'est un calcul d'élément de matrice dipolaire puisqu'il s'agit d'un opérateur faisant appel au moment dipolaire de l'électron de l'atome émetteur. Dû à sa simplicité, l'atome d'hydrogène sera d'abord utilisé pour dériver les éléments de matrice dipolaire. Seulement quelques ajustements seront ensuite nécessaires pour l'hélium puisqu'il est traité avec l'approximation hydrogénoïde.

Pour définir cet élément de matrice, il est nécessaire de décrire la position de l'électron par rapport au noyau en utilisant la définition des harmoniques sphériques  $\ell = 1$  (Griffiths, 2017)

$$\begin{aligned} Y_{1,+1} &= -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x + iy}{\sqrt{2}r} \\ Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \\ Y_{1,-1} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x - iy}{\sqrt{2}r}, \end{aligned} \tag{2.4.1}$$

où  $x$ ,  $y$  et  $z$  sont les positions cartésiennes de l'électron autour de son noyau,  $r$  est sa distance radiale et  $i = \sqrt{-1}$  indique la partie imaginaire de l'expression. L'usage de ces harmoniques permet de définir simplement les valeurs de  $x$ ,  $y$  et  $z$  qui sont nécessaires pour décrire l'opérateur dipolaire. Ces valeurs peuvent être extraites de l'équation 2.4.1

$$\begin{aligned} x &= -\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \frac{r}{\sqrt{2}} (Y_{1,+1} - Y_{1,-1}) \\ y &= i\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \frac{r}{\sqrt{2}} (Y_{1,+1} + Y_{1,-1}) \\ z &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1,0}. \end{aligned} \tag{2.4.2}$$

À l'aide de la définition apportée par l'équation précédente, l'opérateur  $\mathbf{F} \cdot \mathbf{d}$  peut être décrit par une somme pondérée d'harmoniques sphériques de nombre quantique  $\ell = 1$

$$\begin{aligned}
\mathbf{F} \cdot \mathbf{d} &= e\mathbf{F} \cdot \mathbf{R} \\
&= eF_0 (\beta_x x + \beta_y y + \beta_z z) \\
&= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} er \sum_{\mu=-1}^{+1} a_\mu(\boldsymbol{\beta}) Y_{1\mu},
\end{aligned} \tag{2.4.3}$$

où  $a_\mu(\boldsymbol{\beta})$  sont les coefficients complexes dépendant du champ électrique définis par la manipulation de l'équation 2.4.2. L'équation précédente permet alors de définir l'élément de matrice de l'équation 2.3.11 pour le cas  $|\ell - \ell'| = 1$

$$\langle n \ell m s | \mathbf{F} \cdot \mathbf{R} | n' \ell' m' s' \rangle = \sum_{\mu=-1}^{+1} a_\mu(\boldsymbol{\beta}) \langle n \ell m s | \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1\mu} | n' \ell' m' s' \rangle. \tag{2.4.4}$$

L'avantage de poser l'équation 2.4.4 de cette façon est que l'élément de matrice  $\langle n \ell m s | \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1\mu} | n' \ell' m' s' \rangle$  peut être évalué semi-analytiquement pour l'atome d'hydrogène, comme un produit d'intégrales

$$\begin{aligned}
\langle n \ell m s | \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1\mu} | n' \ell' m' s' \rangle &= \int_0^{+\infty} R_{n\ell} R_{n'\ell'} r^3 dr \\
&\times \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int Y_{\ell m}^* Y_{1\mu} Y_{\ell' m'} d\Omega \\
&\times \langle \chi_s | \chi_{s'} \rangle,
\end{aligned} \tag{2.4.5}$$

où  $R_{n\ell}$ ,  $Y_{\ell m}$  et  $\chi_s$  sont respectivement les composantes radiale, angulaire et spinale de la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène. La partie spinale de cette équation nous informe que le spin  $s$  est conservé lors d'une transition, puisque

$$\langle \chi_s | \chi_{s'} \rangle = \delta_{ss'} \tag{2.4.6}$$

où  $\delta_{ss'}$  est un delta de Kronecker. L'intégrale angulaire pour sa part se résout analytiquement en l'exprimant selon les coefficients de Clebsch-Gordan appropriés (Rose, 1957)

$$\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int Y_{\ell m}^* Y_{1\mu} Y_{\ell' m'} d\Omega = \sqrt{\frac{3(2\ell' + 1)}{4\pi(2\ell + 1)}} C(\ell' 1 \ell; m' \mu m) C(\ell 1 \ell'; 0 0 0), \tag{2.4.7}$$

où les  $C(\ell' 1 \ell; m' \mu m)$  sont des coefficients de Clebsch-Gordan. Les coefficients non nuls sont présentés dans le tableau 2.1.

**Tab. 2.1.** Coefficients de Clebsch-Gordan  $C(\ell'1\ell; m'\mu m)$

$\ell$	$\mu = 1$	$\mu = 0$	$\mu = -1$
$\ell' + 1$	$\left[ \frac{(\ell'+m)(\ell'+m+1)}{(2\ell'+1)(2\ell'+2)} \right]^{1/2}$	$\left[ \frac{(\ell'-m+1)(\ell'+m+1)}{(2\ell'+1)(\ell'+1)} \right]^{1/2}$	$\left[ \frac{(\ell'-m)(\ell'-m+1)}{(2\ell'+1)(2\ell'+2)} \right]^{1/2}$
$\ell'$	$-\left[ \frac{(\ell'+m)(\ell'-m+1)}{2\ell'(\ell'+1)} \right]^{1/2}$	$\left[ \frac{m^2}{(\ell'(\ell'+1))} \right]^{1/2}$	$\left[ \frac{(\ell'-m)(\ell'+m+1)}{2\ell'(\ell'+1)} \right]^{1/2}$
$\ell' - 1$	$\left[ \frac{(\ell'-m)(\ell'-m+1)}{2\ell'(2\ell'+1)} \right]^{1/2}$	$-\left[ \frac{(\ell'-m)(\ell'+m)}{\ell'(2\ell'+1)} \right]^{1/2}$	$\left[ \frac{(\ell'+m)(\ell'+m+1)}{2\ell'(2\ell'+1)} \right]^{1/2}$

Le nombre limité d'éléments de matrice dipolaire non nul mène aux règles de sélection dipolaire décrite par les nombres quantiques  $\ell$  et  $m$  suivants

$$\ell = \ell' \pm 1, \quad m = m' + \mu \quad (\mu = \pm 1, 0). \quad (2.4.8)$$

Si l'équation 2.4.6 donne 1 (quand  $s = s'$ ) et que l'équation 2.4.8 est respectée, l'élément de matrice dipolaire est non-nul et la transition entre les deux niveaux est dite permise. Si, dans le cas contraire, au moins une des conditions n'est pas respectée, l'élément de matrice dipolaire est nul et la transition est dite interdite. L'intégrale radiale de l'équation 2.4.5 peut alors être contrainte par les règles de sélection (voir équation 2.4.8) afin de traiter uniquement les cas de transitions permises

$$\int_0^{+\infty} R_{n\ell} R_{n',\ell-1} r^3 dr. \quad (2.4.9)$$

Cette équation n'est pas analytique sauf dans le cas où  $n' = n$ . Toutefois, Oertel & Shomo (1968) ont fait le calcul de cette intégrale en se basant sur le cas analytique

$$\int_0^{+\infty} R_{n\ell} R_{n',\ell-1} r^3 dr = \frac{3n}{2} \sqrt{n^2 - \ell^2} \phi(n', n, \ell) a_0, \quad (2.4.10)$$

où la fonction  $\phi$  vaut 1 lorsque  $n' = n$  et  $a_0$  est le rayon de Bohr.

L'élément de matrice dipolaire de l'atome d'hydrogène est alors calculé de la manière suivante en combinant les résultats des équations 2.4.7 et 2.4.10

$$\begin{aligned} \langle n \ell m | \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1\mu} | n', \ell - 1, m' \rangle &= \frac{3n}{2} \sqrt{\frac{(n^2 - \ell^2)(2\ell - 1)}{2\ell + 1}} \phi(n', n, \ell) \\ &\times C(\ell - 1, 1\ell; m'\mu m) C(\ell 1, \ell - 1; 000) a_0, \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

pour des états de même spin.

Cette équation décrit également les éléments de matrice dipolaire de l'atome d'hélium dans l'approximation hydrogénoïde, qui est valable pour les niveaux inférieurs et supérieurs des raies du visible. L'approximation consiste à considérer un nombre quantique  $n$  (qui n'est pas nécessairement entier) dit effectif défini par l'équation suivante

$$n_{\text{eff}} = (Z_{\text{tot}} + 1) \sqrt{\frac{E_H^{\text{ionis}}}{E_{1j}^{\text{ionis}} - E_{ij}}}, \quad (2.4.12)$$

où  $Z_{\text{tot}}$  est la charge de l'ion considéré,  $E_H^{\text{ionis}}$  et  $E_{1j}^{\text{ionis}}$  sont respectivement les énergies d'ionisation de l'atome d'hydrogène et de l'ion  $j$  à partir du fondamental, et  $E_{ij}$  est l'énergie du niveau  $i$  de l'ion  $j$  par rapport au fondamental. Ainsi, à l'aide de l'équation 2.4.12, l'équation 2.4.11 s'écrit

$$\begin{aligned} \langle n \ell m | \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1\mu} | n', \ell - 1, m' \rangle &= \frac{3n_{\text{eff}}}{2} \sqrt{\frac{(n_{\text{eff}}^2 - \ell^2)(2\ell - 1)}{2\ell + 1}} \phi(n'_{\text{eff}}, n_{\text{eff}}, \ell) \\ &\times C(\ell - 1, 1\ell; m' \mu m) C(\ell 1, \ell - 1; 000) a_0, \end{aligned} \quad (2.4.13)$$

pour le cas d'un atome d'hélium hydrogénoïde et des états de même spin.

Cette équation permet de calculer les éléments de matrice dipolaire de l'hélium neutre pour deux problèmes que nous rencontrons dans le calcul de profils. Le premier est la détermination des valeurs de  $\Omega_{\nu\ell}^{m'm}$  dans l'équation 2.3.12 lorsqu'il y a perturbation du niveau supérieur du système quantique par un champ électrique. Ces états possèdent des nombres quantiques  $n'$  identiques aux nombres quantiques  $n$  à l'intérieur de l'approximation posée à l'équation 2.3.7. Le deuxième est celui de la transition entre le niveau supérieur perturbé et le niveau inférieur non perturbé du système quantique. Pour ce cas, le nombre quantique  $n$  du niveau inférieur de la transition et le nombre quantique  $n'$  du niveau supérieur sont différents.

Dans ce chapitre, nous avons décrit les niveaux d'énergies de l'atome d'hélium perturbés par la présence d'un champ électrique. Toutefois, pour décrire le profil d'élargissement Stark dans son ensemble, il faut également décrire le comportement de la fonction d'onde de l'atome d'hélium perturbé en fonction de temps, ainsi que celui du champ électrique. C'est le sujet du prochain chapitre.



# Chapitre 3

---

## Évolution temporelle

Au chapitre précédent, nous avons décrit la méthode permettant de trouver les valeurs propres, pour un seul champ électrique, des transitions perturbées. Ce champ électrique change dans le temps dû au mouvement des ions et électrons (perturbateurs), ce qui change à la fois sa valeur et la fonction d'onde de l'atome d'hélium perturbé (émetteur). La fonction d'onde doit respecter l'équation de Schrödinger lors de ce changement

$$i\hbar \frac{d\psi(\mathbf{R},t;\mathbf{x})}{dt} = [H_0 + e\mathbf{F}(t) \cdot \mathbf{R}]\psi(\mathbf{R},t;\mathbf{x}), \quad (3.0.1)$$

où  $\psi(\mathbf{R},t;\mathbf{x})$  est la fonction d'onde de l'atome d'hélium perturbé,  $\mathbf{R}$  est un opérateur vectoriel qui représente les coordonnées internes de l'émetteur,  $\mathbf{F}(t)$  — une forme contractée de  $\mathbf{F}(\mathbf{x}(t))$  — est le vecteur du champ électrique à la position de l'émetteur et  $H_0$  est l'hamiltonien non perturbé de l'atome d'hélium. Le terme  $\mathbf{x}$  représente les vecteurs positions des perturbateurs classiques et n'est donc pas un opérateur. Cette différence est mise en évidence par l'ajout du « ; ».

L'équation ci-dessus est impossible à résoudre exactement puisque le champ électrique est variable dans le temps. Nous traiterons ce problème en deux étapes : d'abord en considérant le champ électrique fixe dans le temps, puis en choisissant un pas de temps spécifique simplifiant la résolution numérique de l'équation de Schrödinger. Toutefois, avant d'effectuer la résolution numérique de cette équation, il nous faut décrire les propriétés d'un opérateur essentiel pour la suite de notre discussion.

### 3.1. Opérateur d'évolution temporelle

L'opérateur d'évolution temporelle  $U$  permet de transformer un état quantique  $\psi$  d'un temps  $t_0$  à un temps  $t_1 > t_0$ , résultant de l'évolution du système sous l'effet de tout opérateur hamiltonien  $H$

$$\psi(\mathbf{x}, t_1) = U(t_1, t_0)\psi(\mathbf{x}, t_0). \quad (3.1.1)$$

Avec la définition posée à l'équation 3.1.1, certaines propriétés de cet opérateur peuvent être extraites:

- (1) L'opérateur d'évolution temporelle est unitaire puisque la grandeur de la fonction d'onde doit être unitaire par définition. Ceci implique que

$$UU^\dagger = I. \quad (3.1.2)$$

- (2) L'opérateur  $U$  est égal à l'opérateur identité si ses deux arguments sont identiques, puisque l'on doit retrouver la même fonction d'onde à un temps donné

$$\psi(\mathbf{x}, t_0) = U(t_0, t_0)\psi(\mathbf{x}, t_0)$$

$$\psi(\mathbf{x}, t_0) = I\psi(\mathbf{x}, t_0),$$

où  $U(t_0, t_0) = I$  est l'opérateur identité.

- (3) Cet opérateur peut être appliqué successivement, si et seulement si l'ordre temporel est respecté

$$\psi(\mathbf{x}, t_2) = U(t_2, t_1)\psi(\mathbf{x}, t_1)$$

$$\psi(\mathbf{x}, t_2) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0)\psi(\mathbf{x}, t_0),$$

où  $t_2 > t_1 > t_0$ . De façon plus générale, on peut écrire:

$$\psi(\mathbf{x}, t_n) = \left( \prod_{j=0}^{n-1} U(t_{j+1}, t_j) \right) \psi(\mathbf{x}, t_0).$$

- (4) Il est aussi invariant par rapport à une translation du temps lorsque l'hamiltonien  $H$  n'a pas de dépendance sur le temps, puisque seule la différence entre deux temps successifs est importante pour cet opérateur. Il est plus intuitif de comprendre cette propriété lorsque la solution de l'opérateur pour un hamiltonien indépendant du temps est présenté

$$U(t_{j+1}, t_j) = e^{-iH(t_{j+1}-t_j)/\hbar}, \quad (3.1.3)$$

où la différence  $t_{j+1} - t_j$  est conservée sous une translation du temps.

Les propriétés de l'opérateur d'évolution temporelle étant posées, il est possible d'écrire l'équation de Schrödinger dans la représentation de Heisenberg (selon l'opérateur d'évolution temporelle et non la fonction d'onde). En partant de la troisième propriété, dans le cas où le maillage est très fin, le produit d'opérateur  $U(t_{j+1}, t_j)$  tend vers un opérateur continu  $U(t, 0)$

$$\prod_{j=0}^{n-1} U(t_{j+1}, t_j) = U(t, 0), \quad (3.1.4)$$

où  $n$  est le nombre de mailles temporelles entre le temps initial  $t_0 \equiv 0$  et le temps arbitraire  $t_n \equiv t$ . En ayant maintenant une forme d'opérateur continu, l'équation 3.0.1 peut être réécrite afin de retirer la dépendance sur le temps de la fonction d'onde

$$i\hbar \frac{dU(t, 0)\psi(\mathbf{x}, 0)}{dt} = [H(t)]U(t, 0)\psi(\mathbf{x}, 0). \quad (3.1.5)$$

Sachant que la fonction d'onde  $\psi(\mathbf{x}, 0)$  ne dépend pas du temps et qu'elle est solution de l'équation de Schrödinger, l'équation 3.1.5 peut être simplifiée

$$i\hbar \frac{dU(t, 0)}{dt} = [H(t)]U(t, 0). \quad (3.1.6)$$

L'équation 3.1.6 démontre que la situation initiale posée par l'équation 3.0.1 se réduit à la détermination de l'opérateur d'évolution temporelle continu  $U(t, 0)$ . Cette équation est encore impossible à résoudre analytiquement lorsque l'hamiltonien  $H$  dépend du temps. Toutefois, l'opérateur  $U(t_{j+1}, t_j)$  permet des approximations, grâce à ses propriétés, nous rapprochant de la résolution exacte de cette équation, qui sera discutée à la section 3.5.2.

Avant de considérer ce problème, il est tout d'abord nécessaire d'effectuer un lien entre l'espace des fréquences et l'évolution temporelle de la position des perturbateurs produisant le champ électrique.

### 3.2. Fonction d'autocorrélation

Le lien recherché entre l'espace des fréquences et l'évolution temporelle de la position des perturbateurs peut être obtenu en repartant de l'équation fondamentale pour le calcul du profil Stark (équation 2.3.2)

$$F(\omega) = \sum_{if} \delta(\omega - \omega_{if}) |\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2 \rho_i. \quad (3.2.1)$$

et en effectuant sa transformée de Fourier

$$\begin{aligned} C(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} \sum_{if} \delta(\omega - \omega_{if}) |\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2 \rho_i d\omega \\ &= \sum_{if} e^{-i\omega_{if} t} |\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2 \rho_i, \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

où  $t$  représente le temps d'évolution du système considéré. Cette équation décrit la forme du profil de la raie spectrale dans l'espace temporel et est nommée *fonction d'autocorrélation*. Cette fonction permet de mesurer l'influence du champ électrique en fonction du temps d'évolution du système. Puisque les perturbateurs sont à l'origine du champ électrique, l'équation 3.2.2 décrit l'influence des différents arrangements spatiaux sur l'atome d'hélium perturbé. Après avoir construit la fonction d'autocorrélation, il est possible de retourner dans l'espace des fréquences afin de trouver le profil de raie d'intérêt en effectuant une transformée de Fourier inverse

$$F(\omega) = \pi^{-1} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} e^{i\omega s} C(s) ds, \quad (3.2.3)$$

où  $\operatorname{Re}$  indique la partie réelle de l'intégrale.

Dans le prochain chapitre, les équations 3.2.2 et 3.2.3 seront intégrées dans un programme de simulation numérique qui produit une séquence temporelle de champs électriques à la position de l'émetteur en fonction du mouvement des perturbateurs. Chacune des configurations produira une fonction d'autocorrélation et un profil de raie distincts. Toutefois, il sera important de générer un grand nombre de fonctions d'autocorrélation avec des conditions initiales distinctes, puisque le profil spectral observé est produit par plusieurs atomes d'hélium perturbés, chacun soumis à une configuration particulière de perturbateurs dynamiques. Le passage de la fonction d'autocorrélation au profil de raie sera alors décrit par l'équation suivante

$$F(\omega) = \pi^{-1} \text{Re} \int_0^\infty e^{i\omega s} \{C(s)\}_N ds, \quad (3.2.4)$$

où  $\{C(s)\}_N$  représente la fonction d'autocorrélation moyennée sur un ensemble de  $N$  configurations distinctes. La fonction d'autocorrélation représente la pièce centrale du traitement dynamique de la simulation, et il est alors important de la décrire plus en détail avant de pouvoir procéder au calcul de profils de raie à partir de simulations numériques.

### 3.3. Dérivation complète de la fonction d'autocorrélation

Afin de faciliter les calculs numériques, nous exprimerons la fonction d'autocorrélation (équation 3.2.2) en termes de l'opérateur d'évolution temporelle. Ceci permettra de traiter plus facilement la solution de l'équation de Schrödinger selon la variation du champ électrique en fonction du temps. Nous suivrons les développements théoriques de Baranger (1962), Griem (1974) et Smith et al. (1969) afin de trouver une forme plus adéquate pour le calcul numérique.

Le système considéré est celui de l'émetteur avec l'ensemble des perturbateurs à proximité (émetteur-perturbateurs), dont la fonction d'onde satisfait l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} \chi = H \chi, \quad (3.3.1)$$

où  $\chi(\mathbf{R}, \mathbf{x}_p, t)$  est la fonction d'onde du système avec  $\mathbf{R}$ , l'opérateur de la position orbitale de l'électron de l'émetteur, et  $\mathbf{x}_p$ , l'opérateur de position des perturbateurs. L'hamiltonien  $H$  est décrit par

$$H = H_0 + H_p + V, \quad (3.3.2)$$

où  $H_0$  est l'hamiltonien de l'émetteur,  $H_p$  est l'hamiltonien des perturbateurs, qui comprend leurs interactions, et  $V$  est un potentiel d'interaction entre l'émetteur et les perturbateurs. Ces trois opérateurs quantiques ne dépendent pas du temps puisque le système émetteur-perturbateurs est à l'équilibre (Smith et al., 1969). Ceci permet d'écrire l'équation 3.2.2 en termes des énergies  $E$  des états initiaux ( $i$ ) et finaux ( $f$ ) qui sont des états stationnaires de l'hamiltonien  $H$  indépendants du temps

$$C(t) = \sum_{if\mu} e^{iE_f t/\hbar} e^{-iE_i t/\hbar} \langle f | d_\mu^\dagger | i \rangle \rho_i, \quad (3.3.3)$$

où la somme est faite sur tous les états stationnaires du système émetteur-perturbateurs  $i$  et  $f$ , et  $\rho_i$  est l'élément diagonal  $\langle i|\rho|i\rangle$  de la matrice densité  $\rho$ .  $\rho_i$  représente alors un poids statistique.

Il est possible de modifier cette dernière équation en exprimant les termes exponentiels comme des éléments de matrice des états initiaux et finaux décrit par l'opérateur hamiltonien. Puisque les matrices  $e^{\pm iHt/\hbar}$  sont diagonales dans la base des états stationnaires du système émetteur-perturbateurs, les exponentielles présentes dans l'équation 3.3.3 en sont les éléments diagonaux. Ainsi, l'équation 3.3.3 s'écrit

$$C(t) = \sum_{ii'ff'\mu} \langle i|d_\mu|f'\rangle \langle f'|e^{iHt/\hbar}|f\rangle \langle f|d_\mu^\dagger|i'\rangle \langle i'|e^{-iHt/\hbar}|i\rangle \rho_i. \quad (3.3.4)$$

En sachant que  $U = e^{-iHt/\hbar}$  dans le cas où l'hamiltonien ne dépend pas du temps (section 3.1), nous arrivons à l'équation suivante

$$C(t) = \sum_{ii'ff'j\mu} \langle i|d_\mu|f'\rangle \langle f'|U^\dagger|f\rangle \langle f|d_\mu^\dagger|i'\rangle \langle i'|U|j\rangle \langle j|\rho|i\rangle, \quad (3.3.5)$$

puisque la matrice densité est diagonale lorsque le système est à l'équilibre (Smith et al., 1969), comme dans le cas présent.

Pour simplifier cette équation, qui est dite matricielle, nous aurons besoin d'introduire deux concepts concernant la manipulation des bra-ket:

- (1) Si une somme est effectuée sur l'ensemble des états stationnaires d'un système, il est possible de définir un opérateur de fermeture comme suit

$$\sum_f |f\rangle \langle f| = I.$$

- (2) Un opérateur est défini selon des états du système. Si l'ensemble des états est considéré dans la base de calcul, il est possible de former une matrice avec cet opérateur. Lorsque l'opérateur se situe entre un bra et un ket, l'élément de matrice décrit par cette paire d'état en est le résultat. Une somme des éléments de matrice diagonaux sur l'ensemble des états revient à calculer la trace (Tr) de l'argument matriciel:

$$\sum_i \langle i|A|i\rangle = \text{Tr}(A).$$

En utilisant les deux points ci-dessus, l'équation 3.3.5 peut être réécrite en termes d'une trace

$$\begin{aligned}
C(t) &= \sum_{ii'ff'j\mu} \langle i|d_\mu|f'\rangle \langle f'|U^\dagger|f\rangle \langle f|d_\mu^\dagger|i'\rangle \langle i'|U|j\rangle \langle j|\rho|i\rangle \\
&= \sum_{ii'ff'\mu} \langle i|d_\mu|f'\rangle \langle f'|U^\dagger|f\rangle \langle f|d_\mu^\dagger|i'\rangle \langle i'|U\rho|i\rangle \\
&= \sum_{if\mu} \langle i|d_\mu U^\dagger|f\rangle \langle f|d_\mu^\dagger U\rho|i\rangle \\
&= \sum_i \langle i|\mathbf{d}U^\dagger \mathbf{d}^\dagger U\rho|i\rangle \\
&= \text{Tr}(\mathbf{d}(U^\dagger \mathbf{d}^\dagger U)\rho).
\end{aligned} \tag{3.3.6}$$

La fonction d'autocorrélation est alors décrite par une opération matricielle, qui est la forme la plus générale fournie par la théorie des profils. Toutefois, elle n'est pas pratique quant à son traitement numérique, puisqu'elle tient compte du système complet émetteur-perturbateurs. Ce système est très complexe à traiter numériquement (Gigosos et al., 2018), mais ses deux sous-systèmes sont plus simples. L'approximation de faible couplage entre l'émetteur et les perturbateurs fait l'hypothèse que l'interaction  $V$  a un impact négligeable sur le mouvement des perturbateurs (absence de *backreaction*). Ceci implique que les deux sous-systèmes sont statistiquement indépendants, ce qui permet d'exprimer le poids statistique de l'état du système comme le produit de deux contributions, l'une provenant d'un état de l'ensemble des perturbateurs et l'autre d'un état de l'atome (Smith et al., 1969). De plus, la trace peut être séparée en  $\text{Tr}_a\{\text{Tr}_p\}$

$$C(t) = \text{Tr}_a(\mathbf{d}\text{Tr}_p(U^\dagger \mathbf{d}^\dagger U \rho_p)\rho_a) \tag{3.3.7}$$

où l'indice  $a$  représente la partie traitant de l'émetteur (atome) et  $p$  la partie traitant des perturbateurs.

L'approximation de faible couplage n'est valide que pour le cas où l'énergie d'interaction entre l'atome et les perturbateurs est beaucoup plus petite que l'énergie du milieu ( $\hbar\Delta\omega < kT$ ). Pour une raie dans le visible autour de 4500 Å, l'approximation est valide jusqu'à environ 1000 Å du centre de la raie pour une température de 25,000 K. L'approximation est également valide pour les raies du visible et les longueurs d'ondes plus grandes. Toutefois, il faut faire attention lorsque nous traitons des raies dans l'ultraviolet (UV) puisque cette

approximation, dans les même conditions, ne serait valide que jusqu'à environ 25 Å du coeur des raies autour de 600 Å (584 Å, 522 Å, 517 Å, etc.), qui sont les longueurs d'onde des raies de résonance de l'hélium neutre. L'approximation de faible couplage n'est alors plus valide pour ces raies de résonance.

Puisque les perturbateurs et l'émetteur sont statistiquement indépendants, le sous-système des perturbateurs n'est pas affecté par celui de l'émetteur, et la fonction d'onde  $\chi$  du système (solution de l'équation 3.3.1) est approximée par le produit de celle des sous-systèmes (Smith et al., 1969)

$$\chi(\mathbf{R}, \mathbf{x}_p, t) = \psi(\mathbf{R}, t; \mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}_p, t), \quad (3.3.8)$$

où  $\psi(\mathbf{R}, t; \mathbf{x})$  est la fonction d'onde du sous-système de l'atome qui dépend de la position  $\mathbf{x}$  des perturbateurs classiques et  $\phi(\mathbf{x}_p, t)$  est celle du sous-système des perturbateurs qui dépend de l'opérateur de position des perturbateurs  $\mathbf{x}_p$ .

En appliquant l'opérateur hamiltonien du système émetteur-perturbateurs sur cette fonction d'onde, décrit à l'équation 3.3.2, nous pouvons définir une équation de Schrödinger pour chacun des sous-systèmes

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{x}_p, t) &= H_p \phi(\mathbf{x}_p, t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{R}, t; \mathbf{x}) &= (H_0 + V(\mathbf{x}(t))) \psi(\mathbf{R}, t; \mathbf{x}) \end{aligned} \quad (3.3.9)$$

où  $H_0$  est l'hamiltonien de l'atome non perturbé et  $V(\mathbf{x}(t))$  — qui sera noté  $V(t)$  — est le potentiel d'interaction dépendant de la position des perturbateurs. On définit  $H_a = H_0 + V(t)$  comme l'hamiltonien agissant sur le sous-système de l'émetteur.

Puisque les hamiltoniens  $H_a$  et  $H_p$  n'agissent pas sur les mêmes sous-espaces, l'opérateur d'évolution temporelle du système émetteur-perturbateurs peut alors s'écrire comme le produit de celui de chacun des sous-systèmes

$$U = U_p U_a = U_a U_p,$$

permettant ainsi de modifier l'équation 3.3.7

$$C(t) = \text{Tr}_a(\mathbf{d} \text{Tr}_p(U_a^\dagger U_p^\dagger \mathbf{d}^\dagger U_p U_a \rho_p) \rho_a). \quad (3.3.10)$$

Concentrons-nous maintenant sur l'opérateur de moment dipolaire du système complet émetteur-perturbateurs  $\mathbf{d}$ . Il existe deux types de processus pouvant être décrits:

- (1) Les perturbateurs interagissent avec l'émetteur. Il y a une transition spontanée entre deux états perturbés de l'émetteur produisant un photon.
- (2) Les perturbateurs émettent un photon en interagissant avec l'émetteur ou entre eux (bremsstrahlung, etc.; Smith et al. 1969).

Dans l'étude de l'élargissement des raies, le deuxième processus est négligé (Griem, 1974) puisqu'il s'agit de l'opacité du continu et non des raies. Ainsi, le  $\mathbf{d}$  représente le moment dipolaire de l'électron de l'atome impliqué dans la transition et n'agit que sur les matrices de l'émetteur  $a$ . Pour l'hélium neutre, c'est le moment dipolaire de l'électron excité. La fonction d'autocorrélation peut alors s'écrire comme suit

$$\begin{aligned}
C(t) &= \text{Tr}_a(\mathbf{d} \text{Tr}_p(U_p^\dagger U_p U_a^\dagger \mathbf{d}^\dagger U_a \rho_p) \rho_a) \\
&= \text{Tr}_a(\mathbf{d} \text{Tr}_p(I U_a^\dagger \mathbf{d}^\dagger U_a \rho_p) \rho_a) \\
&= \text{Tr}_a(\mathbf{d} \text{Tr}_p(U_a^\dagger \mathbf{d}^\dagger U_a \rho_p) \rho_a) \\
&= \text{Tr}_a(\mathbf{d} \{U_a^\dagger \mathbf{d}^\dagger U_a\}_{\text{av}} \rho_a),
\end{aligned} \tag{3.3.11}$$

où  $\{\dots\}_{\text{av}}$  représente la moyenne de l'ensemble des configurations dynamiques possibles des perturbateurs qui tient compte d'un poids statistique  $\rho_p$ . Dans notre simulation (chapitre 4), seule la contribution en vitesse (distribution de Maxwell-Boltzmann) est considérée pour le poids statistique des perturbateurs (Smith et al., 1969). Nous omettons pour le reste de notre développement l'indice  $a$  pour alléger la notation.

Le potentiel  $V(t)$  de l'équation 3.3.9 subi par l'électron excité de l'émetteur dépend de la nature des perturbateurs. Dans notre cas, l'effet le plus important est celui du champ électrique produit par ces derniers. Nous ferons l'approximation que la contribution dipolaire est la plus importante et domine toutes les autres (Griem, 1974)

$$V(t) = e\mathbf{F}(t) \cdot \mathbf{R}, \tag{3.3.12}$$

où  $e$  est la charge élémentaire. Puisque ce potentiel n'affecte que l'électron excité de l'atome d'hélium, seul le champ à la position de l'émetteur a une importance dans nos calculs (chapitre 4).

L'équation 3.3.11 traite de l'ensemble des états et des transitions de l'émetteur. Il devient très lourd numériquement de traiter tous les niveaux d'énergie d'un atome simultanément lors du calcul du profil de raie. Nous ferons alors quelques approximations:

- (1) On ne considère qu'une raie à la fois.
- (2) Les niveaux inférieurs et supérieurs ne se mélangent pas (*no Quenching approximation*; Gigosos 2014)
- (3) Les niveaux inférieurs ne sont pas perturbés, car ils sont souvent beaucoup moins sensibles à un champ électrique que les niveaux supérieurs. Ces niveaux inférieurs possèdent donc la même énergie.
- (4) Les états supérieurs de l'hélium perturbé sont projetés dans un sous-espace qui ne comprend que les états de même  $n$ . Les opérateurs  $U$  ne sont calculés que dans ce sous-espace.
- (5) Les états  $|i\rangle$  dans ce sous-espace sont normalisés afin que  $\langle i|i\rangle = 1$ , tel que discuté dans le chapitre 2. Ceci implique que l'opérateur de fermeture  $\sum_i |i\rangle\langle i|$  donne l'identité.

Ces approximations permettent de traiter indépendamment chacune des raies pouvant être produites par l'émetteur. Ainsi, seules les contributions partant du niveau supérieur seront affectées par le champ perturbateur pour une transition donnée. Certains détails additionnels reliés à la résolution numérique de la fonction d'autocorrélation seront discutés à la section suivante.

### 3.4. Changement de base de la fonction d'autocorrélation matricielle

Toute la dérivation de la section précédente a été faite dans la base de l'atome d'hélium perturbé. Du point de vue théorique, le calcul de la trace d'une matrice est indépendante d'une transformation de similarité, donc de la base de calcul choisie. Toutefois, l'information connue des éléments de matrice dipolaire de l'atome d'hélium se trouve dans la base non perturbée (voir chapitre 2). Il faut donc effectuer un changement de base pour pouvoir utiliser ces informations, tout en respectant nos approximations de la section précédente.

Nous effectuerons ce changement de base en repartant de la fonction d'autocorrélation matricielle décrite par l'équation 3.3.5, qui se trouve dans la base des états perturbés. Afin de faciliter la compréhension, l'alphabet grec sera utilisé pour décrire les états perturbés et l'alphabet traditionnel pour décrire les états non perturbés

$$\begin{aligned}
C(t) &= \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'\alpha''} \langle\alpha|\mathbf{d}|\beta'\rangle\langle\beta'|U^\dagger|\beta\rangle\langle\beta|\mathbf{d}^\dagger|\alpha'\rangle\langle\alpha'|U|\alpha''\rangle\langle\alpha''|\rho|\alpha\rangle \\
&= \sum_{\alpha\alpha'\alpha''} \sum_{bb'} \langle\alpha|\mathbf{d}|b'\rangle\langle b'|U^\dagger|b\rangle\langle b|\mathbf{d}^\dagger|\alpha'\rangle\langle\alpha'|U|\alpha''\rangle\langle\alpha''|\rho|\alpha\rangle,
\end{aligned} \tag{3.4.1}$$

où  $\beta = b$  puisque les niveaux inférieurs ne sont pas perturbés (troisième approximation de la section précédente) et  $\alpha$  et  $\alpha'$  représentent l'ensemble des états supérieurs de l'hélium perturbé.

Afin de changer de base pour les états supérieurs, il est nécessaire d'insérer des opérateurs de fermeture faisant appel aux états non perturbés. Cet ajout ne modifie pas le résultat final, car cet opérateur est égal à la matrice identité (cinquième approximation de la section précédente)

$$\begin{aligned}
C(t) &= \sum_{\alpha\alpha'\alpha''} \sum_{aa'bb'} \langle\alpha|a\rangle\langle a|\mathbf{d}|b'\rangle\langle b'|U^\dagger|b\rangle\langle b|\mathbf{d}^\dagger|a'\rangle\langle a'|\alpha'\rangle\langle\alpha'|U|\alpha''\rangle\langle\alpha''|\rho|\alpha\rangle \\
&= \sum_{\alpha\alpha'\alpha''} \sum_{aa'bb'} \langle a|\mathbf{d}|b'\rangle\langle b'|U^\dagger|b\rangle\langle b|\mathbf{d}^\dagger|a'\rangle\langle a'|\alpha'\rangle\langle\alpha'|U|\alpha''\rangle\rho_\alpha\delta_{\alpha\alpha''}\langle\alpha|a\rangle \\
&= \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{aa'bb'} \langle a|\mathbf{d}|b'\rangle\langle b'|U^\dagger|b\rangle\langle b|\mathbf{d}^\dagger|a'\rangle\langle a'|\alpha'\rangle\langle\alpha'|U|\alpha\rangle\langle\alpha|a\rangle\rho_\alpha,
\end{aligned} \tag{3.4.2}$$

où les  $\langle\alpha|a\rangle$  sont les coefficients de changement de base  $C_{\alpha a}$  et  $a$  et  $a'$  sont seulement les états supérieurs non perturbés de l'hélium ayant les nombres quantiques  $n$  et  $\ell$  de la transition considérée. Le sous-ensemble non perturbé est restreint puisque chaque raie représente un problème indépendant.

Pour alléger le temps de calcul numérique, nous pouvons utiliser le fait que la matrice densité est constante dans le temps (Smith et al., 1969) et possède approximativement la même valeur pour tous les niveaux supérieurs perturbés (Griem, 1974). Ainsi, sa valeur est identique pour tous les éléments de la somme et elle peut donc être placée devant la somme et appelée  $\rho_c$ . Pour produire un profil de raie normalisé (voir chapitre 2), la contrainte suivante doit être respectée (Griem, 1974)

$$\sum_{ab} \langle a|\mathbf{d}|b\rangle\langle b|\mathbf{d}^\dagger|a\rangle\rho_c = 1. \tag{3.4.3}$$

La valeur de  $\rho_c$  est alors déterminée par:

$$\rho_c = \frac{1}{\sum_{ab} \langle a|\mathbf{d}|b\rangle \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a\rangle}.$$

La fonction d'autocorrélation matricielle peut être réécrite comme suit afin de s'assurer du respect de la condition de normalisation

$$\begin{aligned} C(t) &= \frac{1}{\sum_{ab} \langle a|\mathbf{d}|b\rangle \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a\rangle} \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{aa'bb'} \langle a|\mathbf{d}|b'\rangle \langle b'|U^\dagger|b\rangle \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a'\rangle \langle a'|\alpha'\rangle \langle \alpha'|U|\alpha\rangle \langle \alpha|a\rangle \\ &= \frac{1}{\sum_{ab} \langle a|\mathbf{d}|b\rangle \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a\rangle} \sum_{aa'bb'} \langle a|\mathbf{d}|b'\rangle \langle b'|U^\dagger|b\rangle \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a'\rangle \langle a'|U|a\rangle. \end{aligned} \quad (3.4.4)$$

Cette équation permet de comprendre comment effectuer le changement de base si une information importante se trouve dans la base de calcul perturbée (par exemple la matrice des énergies qui est diagonale dans cette base). En plus, cette équation permet d'assurer que l'aire sous la courbe de tous profils de raie soit normalisée à 1. Aussi, une propriété intéressante peut être dérivée en regardant le résultat de la somme multipliant  $\rho_c$  lorsque  $t = t_0$

$$\begin{aligned} &\sum_{aa'bb'} \langle a|\mathbf{d}|b'\rangle \langle b'|U(t_0, t_0)^\dagger|b\rangle \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a'\rangle \langle a'|U(t_0, t_0)|a\rangle \\ &\sum_{aa'bb'} \langle a|\mathbf{d}|b'\rangle \langle b'|I|b\rangle \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a'\rangle \langle a'|I|a\rangle \\ &\sum_{aa'bb'} \langle a|\mathbf{d}|b'\rangle I_b \delta_{bb'} \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a'\rangle I_a \delta_{aa'} \\ &\sum_{ab} \langle a|\mathbf{d}|b\rangle \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a\rangle, \end{aligned} \quad (3.4.5)$$

où  $U(t_0, t_0) = I$  selon la propriété 2 de l'opérateur d'évolution temporelle de la section 3.1. Ainsi, au temps  $t = t_0$ , la fonction d'autocorrélation possède la propriété suivante

$$C(t_0) = \frac{\sum_{ab} \langle a|\mathbf{d}|b\rangle \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a\rangle}{\sum_{ab} \langle a|\mathbf{d}|b\rangle \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a\rangle} = 1. \quad (3.4.6)$$

Cette propriété indique qu'une condition équivalente à l'équation 3.4.3 est que  $C(t_0) = 1$ .

L'opérateur d'évolution temporelle  $U(t_{j+1}, t_j)$  est diagonal dans la base perturbée, avec des éléments diagonaux de la forme  $\langle \alpha|U(t_{j+1}, t_j)|\alpha\rangle = e^{-iE_\alpha t/\hbar}$ , où les énergies perturbées sont calculées à l'aide de l'équation 2.3.10. Afin de faire la multiplication matricielle de deux opérateurs d'évolution, il est nécessaire d'utiliser une base commune. La base non

perturbée a l'avantage d'être indépendante du temps et donc commune pour l'ensemble de la simulation contrairement à la base perturbée. Les coefficients de changements de base permettent d'exprimer les éléments de matrice de  $U(t_{j+1},0)$  dans la base non perturbée. En regardant un élément de matrice en particulier, il est possible d'élaborer la démarche à suivre pour les calculer

$$\begin{aligned}
\langle a|U(t_{j+1},0)|a'\rangle &= \langle a|U(t_{j+1},t_j)U(t_j,0)|a'\rangle \\
&= \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{a''} \langle a|\alpha\rangle \langle \alpha|U(t_{j+1},t_j)|\alpha'\rangle \langle \alpha'|a''\rangle \langle a''|U(t_j,0)|a'\rangle \\
&= \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{a''} C_{\alpha a, t_j} C_{a''\alpha', t_j} \langle \alpha|U(t_{j+1},t_j)|\alpha'\rangle \langle a''|U(t_j,0)|a'\rangle,
\end{aligned} \tag{3.4.7}$$

où  $C_{\alpha a, t_j}$  sont les coefficients (équation 2.3.7) de changements de bases au temps  $t_j$ ,  $C_{a\alpha, t_j} = (C_{\alpha a, t_j})^\dagger$ , et  $U(t_j,0)$  est l'opérateur d'évolution temporelle exprimé dans la base non perturbée ayant la contribution de l'ensemble des temps précédents.

Les équations 3.4.4 et 3.4.7 permettent maintenant de traiter les deux cas d'intérêt, soit lorsque le champ électrique est constant ou variant dans le temps. Nous sommes maintenant en mesure de résoudre l'équation de Schrödinger pour ces deux cas particuliers.

## 3.5. Résolution de l'équation de Schrödinger

### 3.5.1. Champ électrique constant dans le temps

Dans le cas où le champ électrique est constant dans le temps, l'hamiltonien n'a pas de dépendance par rapport au temps et l'équation 3.1.6 devient simple à résoudre pour l'opérateur d'évolution temporelle

$$U(t,0) = e^{-i(H_0 + e\mathbf{F}\cdot\mathbf{R})t/\hbar} = e^{-iH_0 t/\hbar}. \tag{3.5.1}$$

La situation traitant un champ constant dans le temps est identifiée comme étant le régime quasi-statique. Afin d'obtenir ce régime, les perturbateurs doivent avoir des positions fixes autour de l'émetteur durant le temps de la simulation. Cette situation est cohérente avec le développement du chapitre 2 (Baranger, 1962) qui introduisait l'effet d'un champ électrique donné sur un émetteur. En ayant cette définition pour l'opérateur d'évolution, l'équation 3.4.2 peut être écrite de la manière suivante

$$\begin{aligned}
C(t) &= \rho_c \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{aa'bb'} C_{\alpha a} C_{a'\alpha'} \langle a|\mathbf{d}|b'\rangle e^{iE_{b't}/\hbar} \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a'\rangle e^{-iE_{\alpha t}/\hbar} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{bb'} \\
&= \rho_c \sum_{\alpha} \sum_{aa'b} C_{\alpha a} C_{a'\alpha} \langle a|\mathbf{d}|b\rangle \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a'\rangle e^{-i(\omega_\alpha - \omega_b)t}.
\end{aligned} \tag{3.5.2}$$

En effectuant la transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation pour le cas quasi-statique (voir équation 3.2.4), le profil de raie attendu est une superposition de delta de Dirac centrés sur les fréquences d'émissions de plusieurs émetteurs perturbés par différents vecteurs de champs électriques

$$F(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \rho_c \sum_{\alpha} \sum_{aa'b} C_{\alpha a}^n C_{a'\alpha}^n \delta(\omega - \omega_{\alpha b}^n) \langle a|\mathbf{d}|b\rangle \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a'\rangle, \tag{3.5.3}$$

où  $F(\omega)$  est la moyenne de  $N$  configurations spatiales de perturbateurs autour de l'émetteur,  $b$  et  $\alpha$  sont les niveaux inférieur et supérieur (perturbés) de la transition de l'atome perturbé et  $\omega_{\alpha b}^n$  est la fréquence de la transition  $\alpha - b$  pour la configuration spatiale  $n$  qui produit un champ  $\mathbf{F}^n$ .

Puisque le cas quasi-statique possède une solution connue pour le profil dans l'espace des fréquences, il sera important d'utiliser ce cas particulier afin de s'assurer que nos outils, soit la transformée de Fourier et la recherche de valeurs propres, sont correctement calibrés. Toutefois, les perturbateurs ne seront pas immobiles et donc le cas quasi-statique ne s'appliquera pas dans notre simulation finale. Nous devons donc trouver un autre moyen de résoudre l'équation de Schrödinger pour le cas où les perturbateurs seront en mouvement.

### 3.5.2. Champ électrique variable dans le temps

L'approche que nous adopterons pour résoudre l'équation de Schrödinger est grandement inspirée du cas quasi-statique. À la section 3.1, l'opérateur continu  $U$  a été défini comme suit

$$U(t_n, 0) = \prod_{j=0}^{n-1} U(t_{j+1}, t_j), \tag{3.5.4}$$

où le temps initial  $t_0 \equiv 0$ . Cette équation est valable pour tout ensemble de valeurs croissantes de  $t_j$ , mais n'est pas applicable s'il est impossible de calculer  $U(t_{j+1}, t_j)$ . Il est alors important de déterminer un pas de temps suffisamment court pendant lequel le champ électrique, et donc l'hamiltonien  $H$ , demeure approximativement constant. Ceci permet d'écrire l'équation de Schrödinger selon un opérateur d'évolution temporelle à la fois

$$i\hbar \frac{dU(t,t_j)}{dt} = [H_0 + e\mathbf{F} \cdot \mathbf{R}]U(t,t_j), \quad (3.5.5)$$

où le champ électrique  $\mathbf{F}$  est constant entre les temps  $t_j$  et  $t_{j+1}$  et prend la valeur  $\mathbf{F}(t_j)$ . L'équation 3.5.5 peut alors être résolue afin de trouver une solution similaire au cas quasi-statique

$$\begin{aligned} U(t_{j+1},t_j) &= e^{-iH(t_j)(t_{j+1}-t_j)/\hbar} \\ &= e^{-iH(t_j)\Delta t/\hbar}, \end{aligned} \quad (3.5.6)$$

où  $\Delta t$  est le pas de temps.

Puisque l'équation 3.5.6 est valide pour décrire la modification de l'opérateur d'évolution temporelle dans un certain intervalle de temps, l'opérateur à un temps  $t_k = k\Delta t$  est obtenu en faisant le produit des opérateurs d'évolution temporelle décrivant le système dans les intervalles de temps  $\Delta t$  précédant le temps  $t_k$  souhaité

$$U(t_k,0) = \prod_{l=1}^k e^{-iH(t_{l-1})\Delta t/\hbar} \quad \text{avec} \quad U(0,0) = I, \quad (3.5.7)$$

où  $I$  est la matrice identité.

Ce développement est uniquement valide lorsque la variation du champ électrique est négligeable durant le pas de temps  $\Delta t$ , d'où l'importance de bien choisir ce dernier. La grandeur du champ électrique dépend directement de la position des perturbateurs dans le volume de calcul. Ainsi, les variations les plus rapides du champ seront produites par les perturbateurs les plus rapides. En général, ce sont les électrons. Pour identifier un temps caractérisant l'intervalle entre les variations importantes du champ  $\tau_c$ , Gigos (2014) propose le rapport entre  $r_0$ , la distance moyenne entre un électron et son voisin le plus proche, et la vitesse thermique  $v_0$

$$\tau_c = \frac{r_0}{v_0} = \left(\frac{3}{4\pi N_e}\right)^{1/3} / \left(\frac{2kT}{\mu_e}\right)^{1/2}, \quad (3.5.8)$$

où  $\mu_e$  est la masse réduite d'une paire électron-émetteur.

Afin de s'assurer d'un pas de temps qui rend l'approximation de champ constant valide, nous utiliserons celui suggéré par Gigos (Gigos & Cardenoso, 1996; Gigos, 2014), qui n'est qu'un centième du temps décrit à l'équation 3.5.8

$$\Delta t = 0.01 \frac{r_0}{v_0} = 0.01 \tau_c. \quad (3.5.9)$$

Ce pas de temps garantit que le champ demeure presque constant dans cet intervalle de temps. Il permet aussi de capturer le détail de la variation du champ sur l'entière durée de la simulation. Le problème apporté par ce pas de temps est le fait qu'il soit seulement défini par les propriétés physiques des électrons. Si le volume de simulation ne comprenait que des électrons, la simulation n'aurait pas à être effectuée pour de nombreux pas de temps. Toutefois, la présence d'ions complexifie le problème dû à leur vitesse en moyenne beaucoup plus faible que celle des électrons. L'effet causé par leur déplacement ne peut alors qu'être perçu sur de longs intervalles de temps. Ce problème revient souvent dans les situations où il y a plusieurs échelles de grandeurs en jeu. L'important est de choisir un bon pas de temps (équation 3.5.9) afin de bien représenter l'effet de toutes les échelles d'intérêt et de garder la cohérence du système considéré.

Nous sommes maintenant en mesure de produire des profils de raies qui tiendront compte de la dynamique des ions et des électrons avec le bon pas de temps. Pour ce faire, il est tout d'abord nécessaire de décrire la construction de l'espace de simulation qui nous permettra de calculer ces profils en respectant la distribution de champs électrique autour de l'émetteur. Nous explorerons dans le chapitre suivant trois méthodes de génération de l'espace, pour ensuite converger vers une méthode qui joint les meilleurs aspects de chacune des approches.

# Chapitre 4

---

## Description de l'espace de simulation

Le profil d'élargissement Stark d'une raie particulière de l'atome d'hélium (l'émetteur) est le résultat de son interaction avec les ions et électrons (les perturbateurs) présents dans son environnement. Il est impossible de modéliser l'ensemble des interactions entre toutes ces particules avec une précision absolue, puisque le coût en temps de calcul serait trop important. Toutefois, l'analyse de ces interactions peut se concentrer sur un seul émetteur situé au centre d'un espace fini, que nous appellerons espace de simulation. Dans les prochaines sections, les approximations principales dans notre modèle quant au mouvement des particules et leur interaction seront présentées afin de reproduire le mieux possible l'environnement de l'émetteur. Nous présenterons ensuite trois méthodes de génération de configuration de particules, soit celle statique, de Hegerfeldt & Kesting (1988) et de Gigoso & Cardenoso (1996), avant de converger vers une méthode hybride incluant les meilleurs aspects des deux dernières méthodes.

### 4.1. Approximations du modèle

#### 4.1.1. Dynamique des perturbateurs

Le fait que l'émetteur demeure immobile, au centre du volume, implique que la simulation doit correctement modéliser la statistique du mouvement des perturbateurs dans le référentiel de l'émetteur, donc leur mouvement relatif. Le déplacement de ces perturbateurs dans le volume est décrit par l'approximation semi-classique de Griem (1974). Elle traite les perturbateurs comme des particules classiques contrairement à l'émetteur qui demeure quantique.

Dans le régime de température et de densité des étoiles naines blanches d'intérêt, un gaz parfait en équilibre thermodynamique local est considéré. La température est constante dans l'ensemble d'un volume de simulation et les particules perturbatrices et émettrices respectent la loi des gaz parfaits. Ceci implique que l'effet de l'interaction entre les perturbateurs sur leur trajectoire est négligé. Les perturbateurs se déplacent alors selon une trajectoire rectiligne (dans le cas où l'émetteur est neutre). De plus, l'approximation de faible couplage de Smith et al. (1969) est considérée (discutée au chapitre 3 plus en détail). Cette dernière indique que l'état et le mouvement des perturbateurs sont indépendants de l'état quantique de l'émetteur.

La vitesse des perturbateurs de la simulation doit alors suivre la distribution maxwellienne des vitesses. Cette dernière est décrite comme suit, dans un intervalle de vitesse entre  $v$  et  $v + dv$  (Landau & Lifshitz, 1969)

$$f(v) dv = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m_p}{kT}\right)^{3/2} v^2 e^{-m_p v^2 / 2kT} dv, \quad (4.1.1)$$

où  $m_p$  est la masse du perturbateur,  $k$  la constante de Boltzmann et  $T$  la température du gaz. Puisque le mouvement des perturbateurs simulés est celui relatif à l'émetteur, il est important de remplacer la masse du perturbateur  $m_p$  par sa masse réduite  $\mu_p$  dans la distribution de Maxwell-Boltzmann, où  $\mu_p$  est décrit de la manière suivante

$$\frac{1}{\mu_p} = \frac{1}{m_p} + \frac{1}{m_{\text{He}}}, \quad (4.1.2)$$

où  $m_{\text{He}}$  est la masse de l'émetteur. Ce modèle a été développé par Seidel & Stamm (1982) et se nomme le « $\mu$ -ion model». L'utilisation de ce modèle nécessite toutefois la réinsertion de l'effet du mouvement de l'émetteur sur le profil final en le convoluant avec un profil Doppler associé à la vitesse thermique de l'émetteur.

Il est maintenant nécessaire de traiter de l'influence des perturbateurs sur le champ électrique produit à la position de l'émetteur.

#### 4.1.2. Influence des perturbateurs

De manière générale, les diverses particules (perturbateurs et émetteurs) du système interagissent entre elles. Pour des particules chargées, l'interaction est celle de Coulomb:

$$\mathbf{F} = \sum_i \frac{q_i}{r_i^3} [(x_i - x_0)\hat{x} + (y_i - y_0)\hat{y} + (z_i - z_0)\hat{z}], \quad (4.1.3)$$

où  $\mathbf{F}$  est le champ électrique,  $q_i$  est la charge électrique du perturbateur  $i$  et  $r_i$  est la distance entre le perturbateur à la position  $(x_i, y_i, z_i)$  et le point  $(x_0, y_0, z_0)$ . Cette équation permet de calculer le champ électrique — appelé microchamp — à la position de l'émetteur. En considérant un grand nombre de configurations spatiales de perturbateurs, diverses valeurs du microchamp peuvent être produites, établissant ainsi une distribution statistique particulière.

Pour des trajectoires rectilignes, les perturbateurs deviennent statistiquement indépendants. Holtsmark (1919) a été le premier à déterminer la distribution statistique de l'intensité du microchamp produit par des perturbateurs indépendants, donnée par

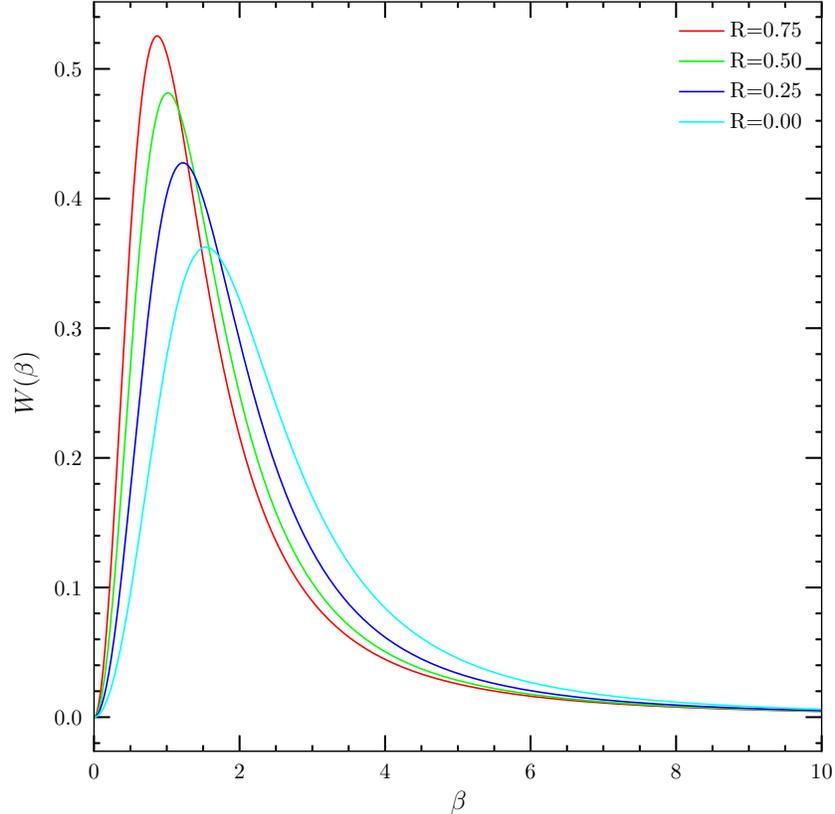
$$H(\beta) = 2\pi \int_0^\infty e^{-x^3/2} \sin(\beta x) x dx, \quad (4.1.4)$$

où  $\beta = F/F_0$  (sans unité) est la norme du champ électrique  $F$  normalisé par le champ de Holtsmark  $F_0$  (équation 2.3.5).

De manière générale, les perturbateurs ne sont pas statistiquement indépendants. Cela fait en sorte que les trajectoires des perturbateurs sont influencées par leur interaction mutuelle. Il existe alors une corrélation entre les différents perturbateurs, qui les fait dévier de la trajectoire rectiligne de Griem (1974). Cette corrélation produit de nouvelles distributions de champs électriques selon les propriétés de l'environnement. Ces distributions de microchamps peuvent être interpolées des tables de Hooper (1968) afin d'obtenir la distribution appropriée pour les propriétés de l'environnement de l'émetteur. Les distributions sont paramétrées par le rapport entre la distance moyenne entre les particules du système et le rayon de Debye d'un type de perturbateur

$$R = \frac{r_p}{r_d} = \left( \frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} \left( \frac{kT}{4\pi e^2 \sum_p Z_p^2 n_p} \right)^{-1/2}, \quad (4.1.5)$$

où  $n = \sum_p n_p$  est la densité du nombre de particules,  $e$  est la charge élémentaire,  $Z_p$  est la charge du type de perturbateur et  $\sum_p$  représente la somme sur tous les types de perturbateurs. La figure 4.1 présente les distributions de probabilité du microchamp,  $W(\beta)$ , en fonction de  $\beta$  pour différentes propriétés physiques de l'environnement, caractérisées par la valeur de  $R$  définie ci-dessus. Plus le rapport  $R$  est grand plus la distribution tend vers des champs normalisés  $\beta$  plus faibles. Toutefois, cette relation n'est pas uniquement due à la corrélation entre les perturbateurs. Elle est aussi due à l'augmentation de la valeur du champ de Holtsmark  $F_0$  dans un environnement plus dense.



**Fig. 4.1.** Distributions de probabilité du microchamp,  $W(\beta)$ , en fonction des propriétés physiques de l’environnement telles que dérivées par Hooper (1968). La courbe où  $R = 0$  représente la distribution de Holtsmark pour des particules statistiquement indépendantes et sans interactions.

La première simulation numérique qui tint compte de cette corrélation entre les perturbateurs fut réalisée par Gigosos et al. (2018). Cette simulation permet de bien représenter le comportement des perturbateurs, mais nécessite un plus grand temps de calcul. Un traitement avec des perturbateurs indépendants (ayant des trajectoires rectilignes) est alors préférable pour limiter le temps de calcul. Toutefois, ce traitement des trajectoires avec une interaction de Coulomb (équation 4.1.3) entre les perturbateurs et l’émetteur ne reproduit pas les distributions de microchamp de Hooper (Gigosos, 2014). Afin de retrouver l’accord avec les distributions de Hooper tout en conservant les trajectoires rectilignes, il est nécessaire de modifier l’interaction entre les perturbateurs et l’émetteur. Pour ce faire, l’effet des perturbateurs est traité par un modèle appelé quasi-particules (Stamm & Smith, 1984).

Ce modèle permet de conserver l’approximation de trajectoire rectiligne mais en décrivant l’interaction entre un perturbateur et l’émetteur par le potentiel de Debye (Gigosos et al., 2003)

$$\mathbf{F} = \sum_i \frac{q_i}{r_i^3} \left(1 + \frac{r_i}{r_d}\right) e^{-r_i/r_d} [(x_i - x_0)\hat{x} + (y_i - y_0)\hat{y} + (z_i - z_0)\hat{z}]. \quad (4.1.6)$$

Cette approche (trajectoire rectiligne et potentiel de Debye) permet de réduire le temps de calcul nécessaire tout en reproduisant correctement la distribution statistique de champs électriques à la position de l’émetteur. C’est une stratégie permettant de respecter la statistique du microchamp sans devoir faire l’étude de la corrélation des interactions entre les perturbateurs et représente donc une situation fictive. L’utilisation de l’équation 4.1.6 fait en sorte que les perturbateurs peuvent être traités comme des particules indépendantes (Gigosos et al., 2003). Hooper (1968) mentionne qu’un champ de Debye produit par des particules indépendantes reproduit presque exactement les distributions de champs électriques qu’il a obtenues avec une méthode beaucoup plus élaborée.

Ce modèle de quasi-particules permet un traitement numérique plus simple, ce qui est la raison pour laquelle la majorité des simulations l’utilise (Gigosos & Cardenoso, 1996). Nous utiliserons aussi ce modèle de quasi-particules afin de générer la distribution de microchamp adéquate. Il sera important, plus loin dans ce chapitre, de valider l’hypothèse qu’un potentiel d’interaction de Debye (et non de Coulomb) permet de retrouver les distributions du microchamp de Hooper.

## 4.2. Générateur de nombres aléatoires et distribution uniforme

Le plus important dans une simulation numérique est de s’assurer de la cohérence physique du système. Pour ce faire, les configurations spatiales de perturbateurs qui produisent les champs électriques et la distribution de vitesses des perturbateurs doivent correctement être représentées. Dans le reste de ce chapitre, nous présenterons des stratégies qui vont nous permettre de générer des distributions de particules dans l’espace des positions et des vitesses à partir d’un générateur de nombres aléatoires uniforme.

Soit une variable  $x$  avec une densité de probabilité proportionnelle à  $f(x)$  pour  $x_{\min} < x < x_{\max}$ . La procédure permettant de générer des valeurs aléatoires de  $x$  satisfaisant cette distribution, à l’aide d’un générateur uniforme entre 0 et 1, comprend les étapes suivantes:

- Calculer la cumulative  $F(x)$  de la distribution, qui prend une valeur entre 0 et 1, par définition:

$$F(x) = \frac{\int_{x_{\min}}^x dy f(y)}{\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} dy f(y)} \quad (4.2.1)$$

- Calculer sa fonction inverse  $F^{-1}(y)$
- Générer une valeur  $\gamma_x$  avec le générateur uniforme, puis
- Adopter

$$x = F^{-1}(\gamma_x) . \quad (4.2.2)$$

Le but de cette approche est de générer une valeur  $x$  satisfaisant une distribution statistique connue, en utilisant une expression faisant appel à une valeur  $\gamma_x$  extraite d'une distribution uniforme entre 0 et 1.

Dans les cas les plus simples, l'intégrale au numérateur de l'équation 4.2.1 peut être calculée analytiquement et permet d'isoler la variable  $x$ . Un bon exemple de cette situation est la génération des coordonnées cartésiennes de particules distribuées uniformément dans un volume en forme de parallélépipède. La position d'un perturbateur est générée à partir des trois équations suivantes puisque la densité de probabilité pour ces variables est une constante ( $f(y) = 1$ )

$$\begin{aligned} x &= \gamma_x(x_{\max} - x_{\min}) + x_{\min} \\ y &= \gamma_y(y_{\max} - y_{\min}) + y_{\min} \\ z &= \gamma_z(z_{\max} - z_{\min}) + z_{\min} , \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

où  $\gamma_{x,y,z}$  sont des valeurs entre 0 et 1 qui respectent la distribution uniforme, et  $(x,y,z)_{(\min,\max)}$  sont les valeurs minimales et maximales que peuvent prendre  $x$ ,  $y$  et  $z$  dans le volume de simulation. Il est toutefois possible de ne pas pouvoir déduire une expression analytique pour la fonction inverse de la variable d'intérêt. Dans ces cas, on utilise le fait que la fonction  $F(x)$  est monotone croissante, et donc qu'il n'existe qu'une seule valeur de  $x$  associée à une valeur de  $F(x)$ . En approximant  $F(x)$  par une fonction numérique de  $x$ , il est toujours possible de générer une valeur pour la variable à partir d'une valeur de la distribution uniforme de 0 à 1 et d'une procédure d'interpolation.

Pour attribuer les valeurs de  $\gamma$  de l'équation 4.2.3, un générateur de nombres aléatoires pouvant reproduire la distribution uniforme doit être utilisé. Il est important de s'assurer

que le générateur de nombres aléatoires n'introduit pas de biais dans la simulation, comme par exemple une corrélation non désirée dans la distribution spatiales des perturbateurs. Cette vérification de la qualité de cet outil est effectuée plus loin dans ce chapitre.

### 4.3. Méthodes de distribution de particules

#### 4.3.1. Axes sphériques

Puisque l'espace à modéliser est isotrope, la forme logique du volume de simulation à adopter est celle d'une sphère. Le système d'axes le plus simple pour ce type de volume est celui des axes sphériques. Nous verrons dans les prochaines sections que ce système d'axes ne permet pas de faire aisément une évolution temporelle du mouvement des perturbateurs. Il est cependant fort utile pour générer un environnement statique qui nous permettra de déterminer le rayon du volume de simulation afin de reproduire la distribution de champ électrique de Hooper (1968, voir figure 4.1). Un bon choix pour le rayon du volume doit à la fois réduire le temps de calcul et considérer les particules contribuant le plus à la valeur du champ électrique pour chacun des volumes. Il est par contre nécessaire, afin de satisfaire l'approximation dipolaire (équation 3.3.12), que les perturbateurs ne puissent être trop près de l'émetteur. Une telle exclusion n'est pertinente qu'autour de l'émetteur puisque les perturbateurs n'interagissent pas entre eux. Un volume d'exclusion est alors défini autour de la position de l'émetteur, décrit par un rayon de l'ordre du rayon de Bohr.

Le rayon du volume de simulation doit être déterminé pour reproduire le comportement statistique attendu du champ électrique produit par la position relative des perturbateurs autour de l'émetteur. La physique du problème implique que ce rayon doit être de l'ordre du rayon de Debye. Même si les perturbateurs à l'intérieur d'un rayon de Debye sont ceux qui contribuent le plus au champ au centre du volume, la contribution des perturbateurs au-delà n'est pas négligeable. Hegerfeldt & Kesting (1988) ont conclu qu'un rayon trois fois plus grand que le rayon de Debye du système (ions et électrons) était suffisant pour bien reproduire la distribution de champ électrique de Hooper. Une validation de cette borne supérieure sera effectuée plus loin dans cette section.

Pour disposer les perturbateurs dans le volume de simulation, il faut exprimer la fonction de densité spatiale dans le système d'axes sphériques. Une densité uniforme implique que le nombre de particules par unité de volume doit satisfaire l'équation suivante

$$f(r, \theta, \phi) d^3r \propto r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi, \quad (4.3.1)$$

où  $r$ ,  $\theta$  et  $\phi$  sont les coordonnées du système d'axes sphériques, soit le rayon, la colatitude et la longitude.

La densité de probabilité 4.3.1 est séparable, ce qui permet d'appliquer la procédure de génération de nombres aléatoires, présentée aux équations 4.2.1 et 4.2.2, aux trois variables séparément. Une valeur aléatoire du rayon s'obtient comme suit

$$\begin{aligned} F(r) &= \frac{\int_{R_{\min}}^r r'^2 dr'}{\int_{R_{\min}}^{R_{\max}} r'^2 dr'} = \frac{r^3 - R_{\min}^3}{R_{\max}^3 - R_{\min}^3} \\ \gamma_r &= \frac{r^3 - R_{\min}^3}{R_{\max}^3 - R_{\min}^3} \\ r^3 &= \gamma_r (R_{\max}^3 - R_{\min}^3) + R_{\min}^3 \\ r &= (\gamma_r (R_{\max}^3 - R_{\min}^3) + R_{\min}^3)^{1/3}, \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

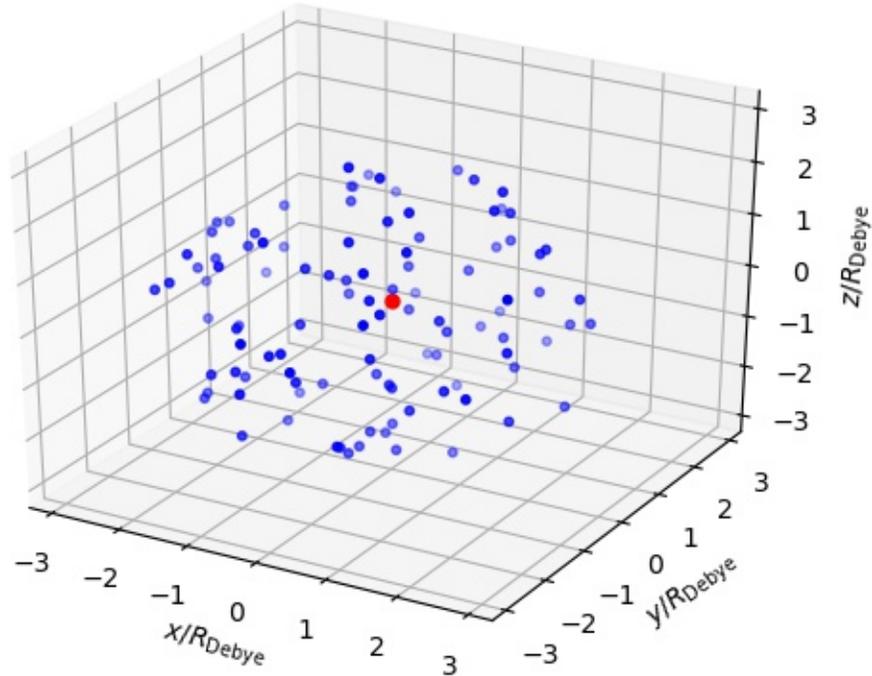
où  $\gamma_r$  est une valeur entre 0 et 1 respectant la distribution uniforme,  $R_{\max}$  est le rayon de l'espace d'intégration, qui est ici trois fois le rayon de Debye cohérent avec les propriétés physiques du système, et  $R_{\min}$  est le rayon d'exclusion, de l'ordre du rayon de Bohr.

La même démarche donne l'expression suivante pour la colatitude en sachant que ses valeurs possibles se trouvent entre 0 et  $\pi$

$$\begin{aligned} F(\theta) &= \frac{\int_0^\theta \sin \theta' d\theta'}{\int_0^\pi \sin \theta' d\theta'} = \frac{1 - \cos \theta}{2} \\ \gamma_\theta &= \frac{1 - \cos \theta}{2} \\ \theta &= \arccos(1 - 2\gamma_\theta), \end{aligned} \quad (4.3.3)$$

où  $\gamma_\theta$  est une valeur entre 0 et 1 respectant la distribution uniforme. Finalement, pour la longitude, définie entre 0 et  $2\pi$ , on trouve

$$\begin{aligned} F(\phi) &= \frac{\int_0^\phi d\phi'}{\int_0^{2\pi} d\phi'} = \frac{\phi}{2\pi} \\ \gamma_\phi &= \frac{\phi}{2\pi} \\ \phi &= 2\pi\gamma_\phi, \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

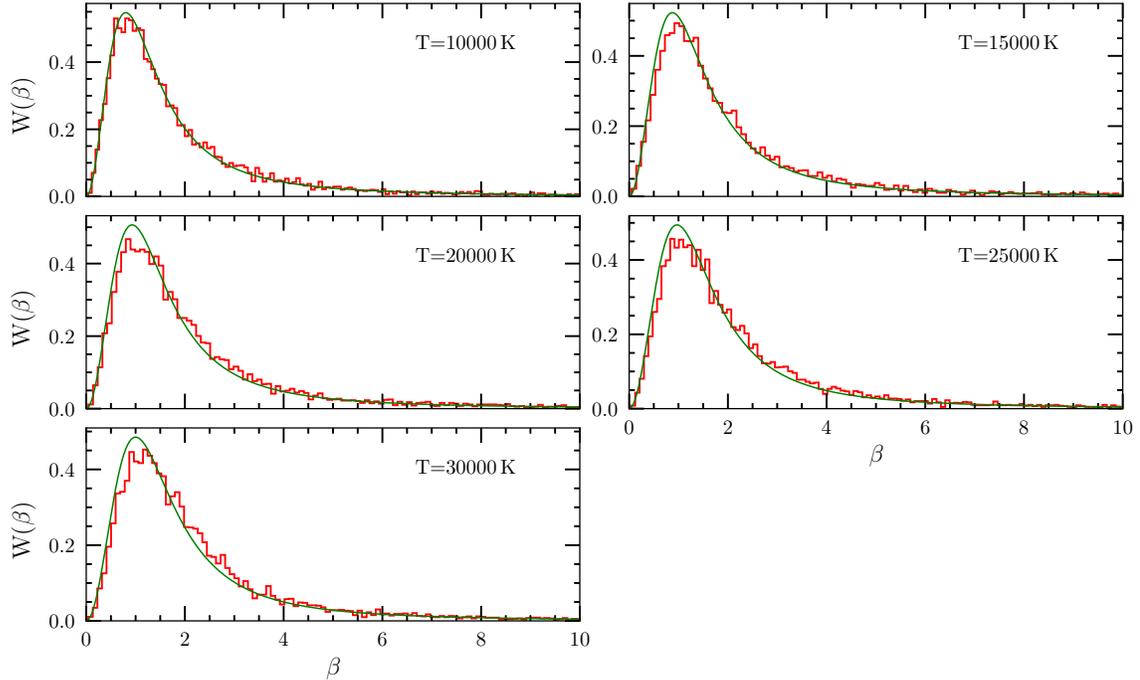


**Fig. 4.2.** Distribution d'un type de particule pour une température de 20,000 K et une densité de particules de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Le point rouge au centre de la figure représente l'émetteur. Les perturbateurs en premier plan sont plus foncés que ceux en arrière plan.

où  $\gamma_\phi$  est une valeur entre 0 et 1 respectant la distribution uniforme.

Les équations 4.3.2 à 4.3.4 permettent de disposer un ensemble de perturbateurs dans le volume de simulation à l'aide d'un générateur de nombres aléatoires uniforme sur l'intervalle (0,1). Trois valeurs aléatoires sont générées pour chaque perturbateur. L'émetteur se trouve au centre de cet espace, tel qu'illustré à la figure 4.2.

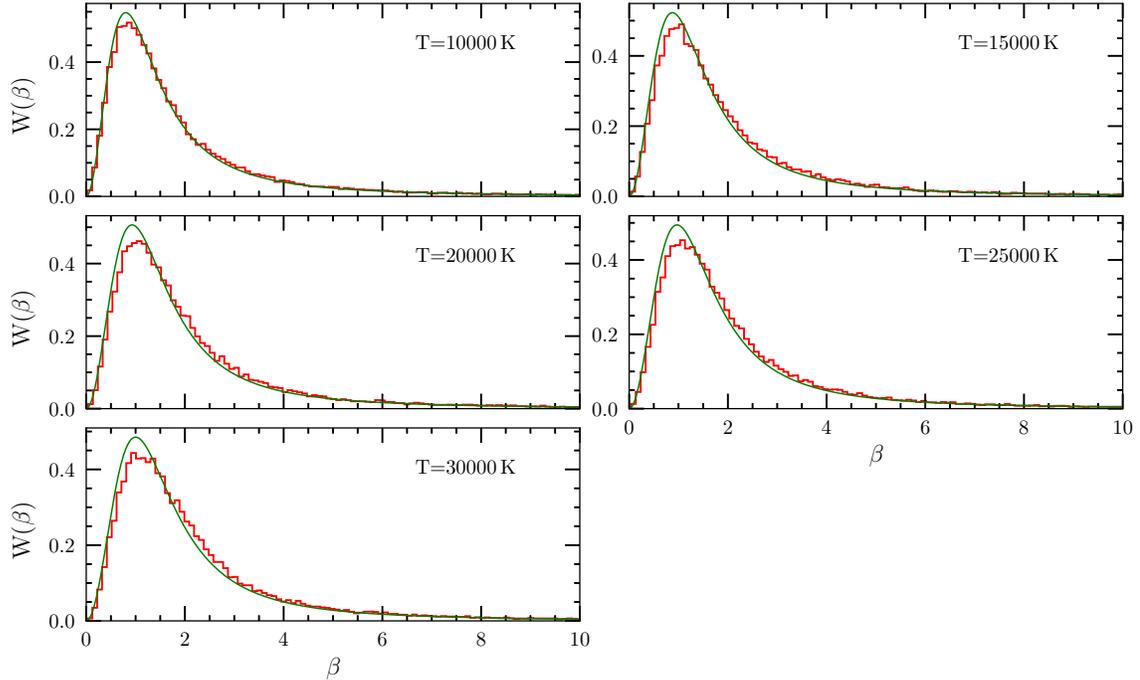
L'ensemble des perturbateurs ainsi généré ne constitue qu'une configuration statique particulière dans un seul volume de simulation, qui produit un champ électrique unique. Toutefois, pour générer un profil de raie reproduisant correctement les observations, il faut que la distribution de champs électriques (décrit par l'équation 4.1.6) sur un grand nombre de volumes soit en accord avec les distributions de Hooper (voir figure 4.1).



**Fig. 4.3.** Comparaison de la distribution de champs électriques pour des températures entre 10,000 K et 30,000 K pour une densité de nombre de particules de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  et 10,000 volumes de simulation. L’histogramme représente le résultat de la simulation alors que la courbe correspond à la distribution théorique de Hooper (1968).

Afin de choisir le nombre adéquat de volumes de simulation, nous avons généré une distribution statistique de champs électriques à partir de 10,000 et 50,000 volumes de simulation, et pour différentes températures et densités. Il est crucial ici que les distributions aléatoires de perturbateurs soient indépendantes d’un volume à l’autre, ce qui souligne l’importance d’adopter un bon générateur de nombres aléatoires. Les figures 4.3 à 4.6 montrent l’effet du nombre de volumes de simulation sur la distribution du champ électrique en fonction de la densité et de la température en considérant le champ électrique produit par les perturbateurs à l’intérieur de trois fois le rayon de Debye.

Ces figures illustrent qu’une génération de 10,000 volumes de simulation permet de reproduire la forme générale de la distribution de champs électriques recherchée malgré d’importantes fluctuations statistiques. Avec une génération de 50,000 volumes, le bruit statistique

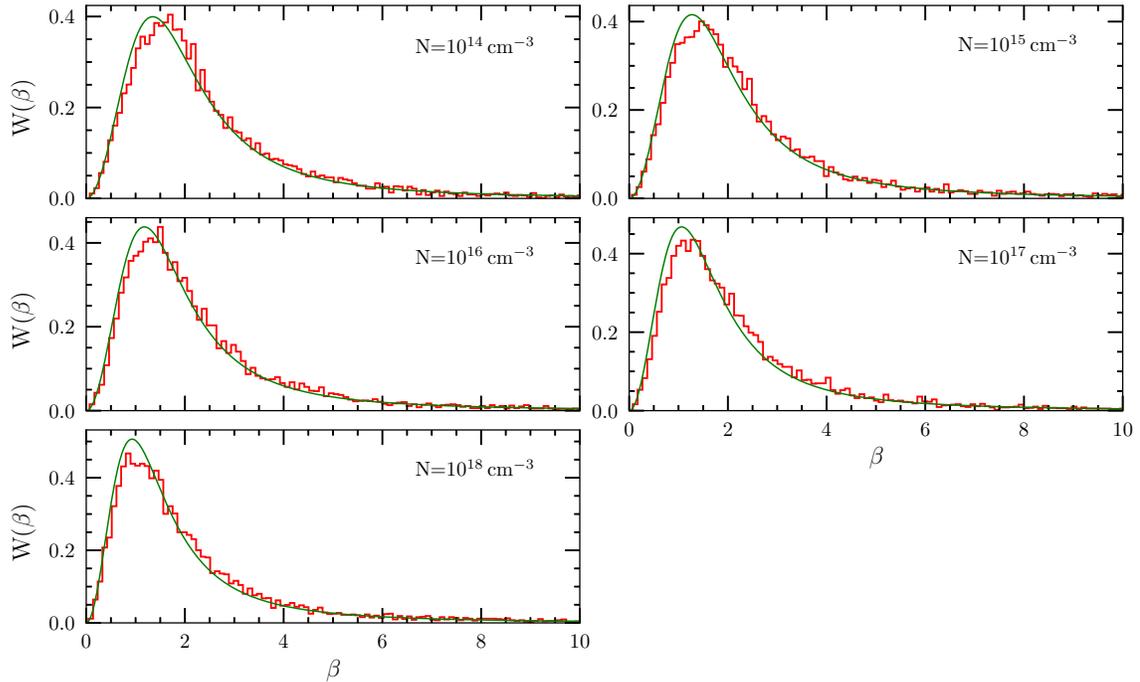


**Fig. 4.4.** Même chose que la figure 4.3 mais pour 50,000 volumes de simulation.

devient négligeable mais le temps de calcul augmente de manière significative. Une génération de 25,000 volumes représente donc un compromis optimal entre le temps de calcul et la réduction du bruit statistique de la distribution de champs électriques.

Le nombre d'espaces n'est pas le seul paramètre à valider pour la simulation produite. Il est également important de valider le rayon du volume de simulation suggéré par Hegerfeldt & Kesting (1988). Les figures 4.7 à 4.10 ont été produites avec un facteur de 3 et 5 fois le rayon de Debye, respectivement. Cette différence de rayon ne change pas de manière significative la distribution de champs électriques produite par la disposition des particules dans le volume (mis à part les fluctuations statistiques). Le rayon que nous avons adopté est donc celui proposé par Hegerfeldt & Kesting (1988), soit 3 fois le rayon de Debye.

Les figures 4.3 à 4.10 démontrent que la génération des divers volumes de simulation reproduit bien la distribution de champs électriques attendue pour un type de particule, ce qui valide notre procédure de génération de perturbateurs et de calcul du champ électrique (équation 4.1.6). Le système d'axes sphériques n'est cependant pas pratique pour traiter l'évolution temporelle, surtout quant à la gestion des conditions frontières de l'espace, en



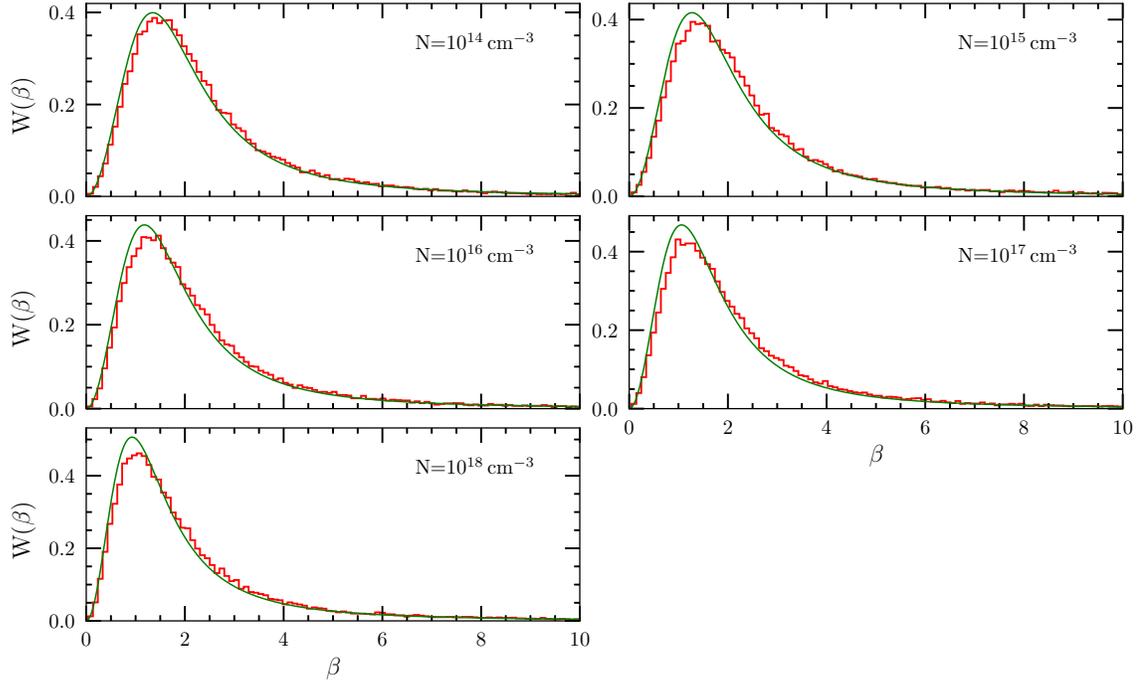
**Fig. 4.5.** Même chose que la figure 4.3 (10,000 volumes de simulation) mais pour une seule température de 20,000 K et des densités de particules entre  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  et  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

particulier le rayon minimal. En effet, il est difficile avec ce système d’axes de garantir que l’ensemble des particules en mouvement demeure hors du volume d’exclusion, près de l’émetteur, pendant toute la durée de la simulation à partir de leur configuration initiale. Il faut choisir un autre système d’axes plus approprié pour la simulation dynamique.

### 4.3.2. Axes d’impact

#### 4.3.2.1. Approche de Hegerfeldt

Le système d’axes le plus approprié pour décrire l’évolution temporelle du volume de simulation, à l’intérieur de l’approximation semi-classique, est celui dit «d’impact» décrit par Hegerfeldt & Kesting (1988). Ce système permet de décrire la position d’une particule à partir des propriétés de sa trajectoire, que l’on suppose rectiligne. Les coordonnées qui caractérisent la position dans le volume de simulation sont :

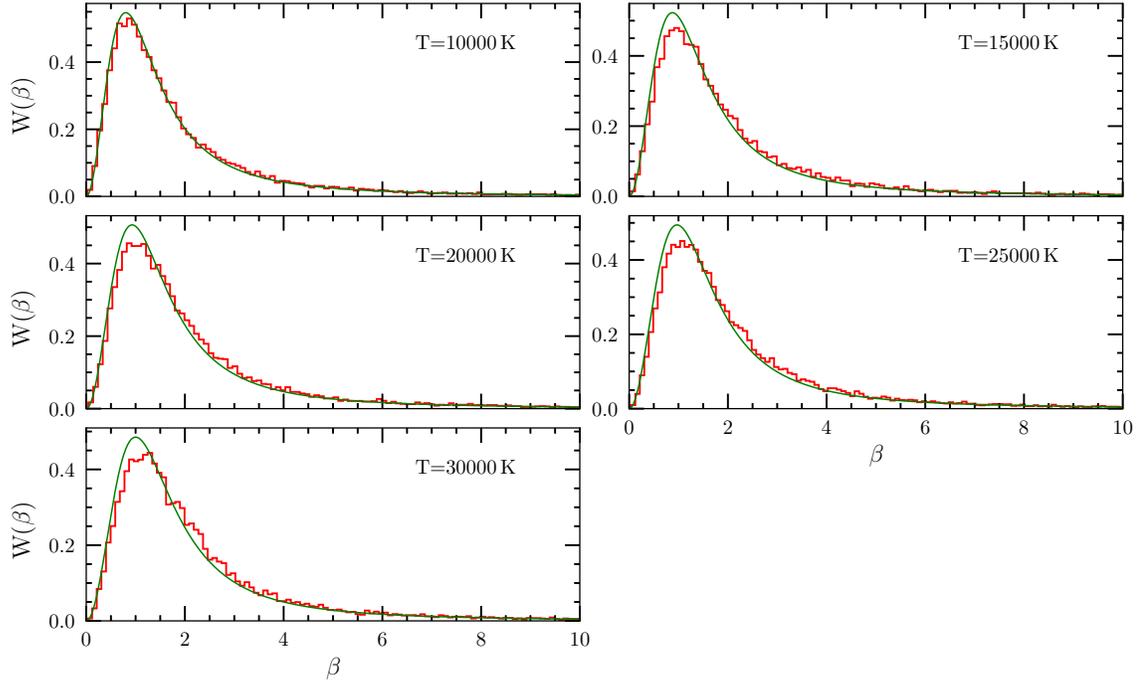


**Fig. 4.6.** Même chose que la figure 4.5 mais pour 50,000 volumes de simulation.

- (1) Le paramètre d'impact  $b$ . Il s'agit de la distance minimale entre un perturbateur et l'émetteur sur l'ensemble de sa trajectoire. On définit qu'une collision se produit lorsque le vecteur position est identique au vecteur d'impact  $\mathbf{b}$ , de norme  $b$ . Ce vecteur est perpendiculaire à la direction de la trajectoire.
- (2) Le temps  $t_0$  est le moment où la particule est le plus près de l'émetteur, donc à la distance  $b$  de l'origine.
- (3) L'angle  $\alpha$ , qui représente l'orientation de la trajectoire du perturbateur dans le plan formé par le vecteur vitesse et le vecteur d'impact (voir la figure 4.11).
- (4) La colatitude  $\theta$  et la longitude  $\phi$ . Ces angles permettent de décrire l'orientation du vecteur vitesse du perturbateur dans l'espace.
- (5) La grandeur de la vitesse du perturbateur  $v$ .

Ce système d'axes simplifie le traitement de l'évolution temporelle des particules dans le volume de simulation. Dans ce système, la position du perturbateur s'exprime de la manière suivante

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} + \mathbf{v}(t - t_0), \quad (4.3.5)$$

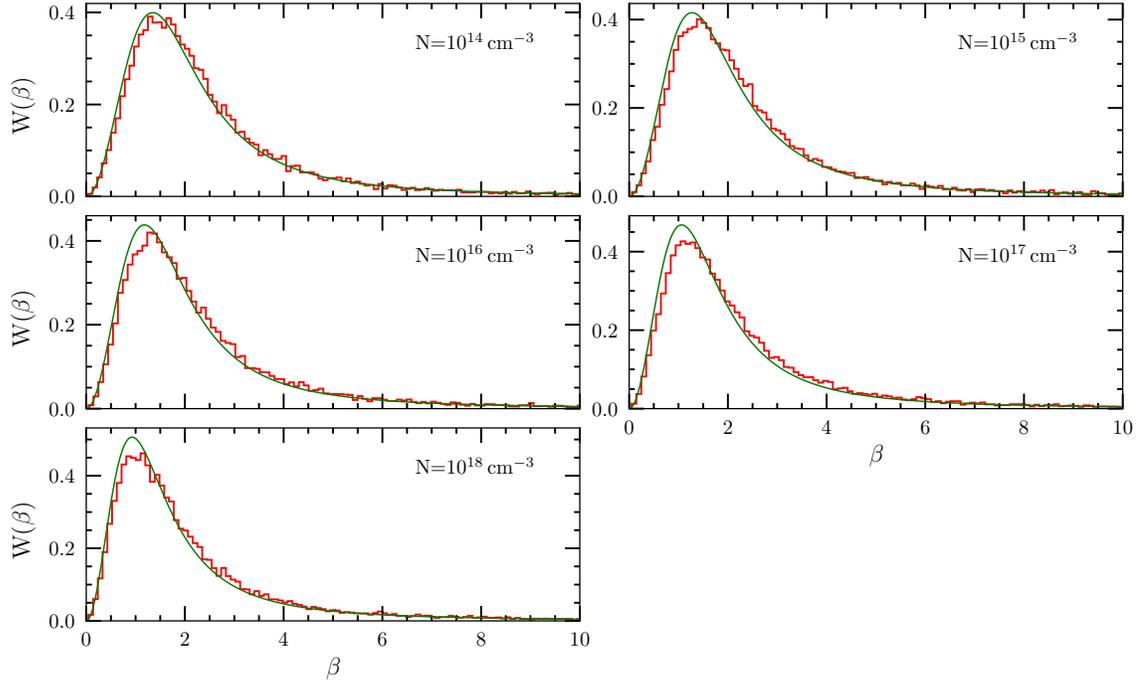


**Fig. 4.7.** Comparaison de la distribution de champs électriques pour des températures entre 10,000 K et 30,000 K pour une densité de nombre de particules de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , 25,000 volumes de simulation et un multiple du rayon de Debye de 3, tel qu'adopté par Hegerfeldt & Kesting (1988). L'histogramme représente le résultat de la simulation alors que la courbe correspond à la distribution théorique de Hooper (1968).

où  $\mathbf{v}$  est le vecteur vitesse du perturbateur et  $\mathbf{b}$  est le vecteur d'impact. Cette équation est cependant trop générale puisque le vecteur  $\mathbf{b}$  ne respecte pas nécessairement la contrainte de perpendicularité entre le vecteur d'impact du perturbateur et de la vitesse. Pour remédier à cela,  $\mathbf{r}$  doit être redéfini de la façon suivante

$$\mathbf{r} = b(\hat{v}_1 \cos \alpha + \hat{v}_2 \sin \alpha) + |v|\hat{v}_3(t - t_0), \quad (4.3.6)$$

où  $\hat{v}_1$  et  $\hat{v}_2$  sont des vecteurs unitaires formant le plan de la figure 4.11 et  $\hat{v}_3$  est le vecteur unitaire parallèle au vecteur vitesse;  $\mathbf{r}$  est maintenant bien perpendiculaire à  $\hat{v}_3$  lorsque  $t = t_0$ . Puisque les vecteurs  $\hat{v}_1$ ,  $\hat{v}_2$  et  $\hat{v}_3$  forment une base orthonormale, il est possible de décrire les trois axes formant le système de la manière suivante

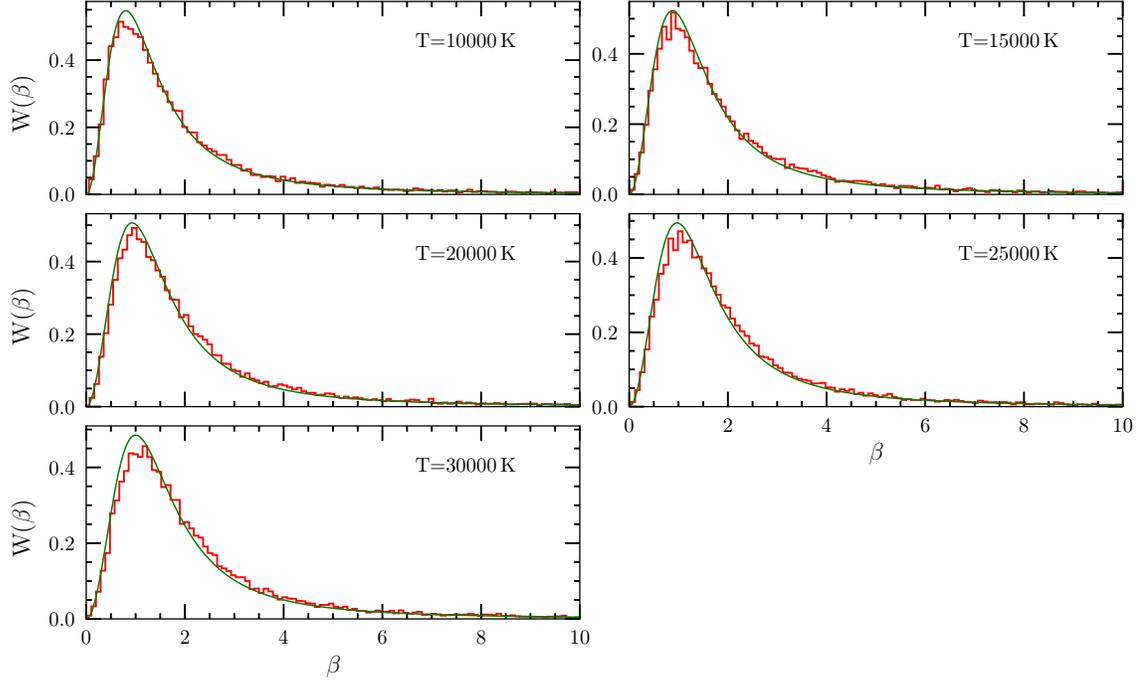


**Fig. 4.8.** Même chose que la figure 4.7 (25,000 volumes de simulation) mais pour une seule température de 20,000 K et des densités de particules entre  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  et  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

$$\begin{aligned}
 \hat{v}_\delta &= (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \\
 \hat{v}_3 &= (\cos \phi \sin \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \theta) \\
 \hat{v}_1 &= (-\cos \phi \cos \theta, -\sin \phi \cos \theta, \sin \theta) \\
 \hat{v}_2 &= (-\sin \phi, \cos \phi, 0).
 \end{aligned}
 \tag{4.3.7}$$

Fixer l'un des axes du système parallèlement à la trajectoire d'un perturbateur permet de suivre plus facilement ce dernier lors de son évolution dans le temps. Chaque perturbateur est donc décrit par six coordonnées en position et vitesse et possède son propre système d'axes. Un avantage majeur de ce système d'axes est de permettre de définir une configuration initiale de particules dont le vecteur d'impact sera dans le volume de simulation, mais hors du volume d'exclusion près de l'émetteur.

Afin que la simulation soit représentative de l'environnement, il est nécessaire de s'assurer d'inclure le bon nombre de perturbateurs. Pour de long temps de simulation, le nombre de



**Fig. 4.9.** Même chose que la figure 4.7 (25,000 volumes de simulation) mais pour un multiple du rayon de Debye de 5.

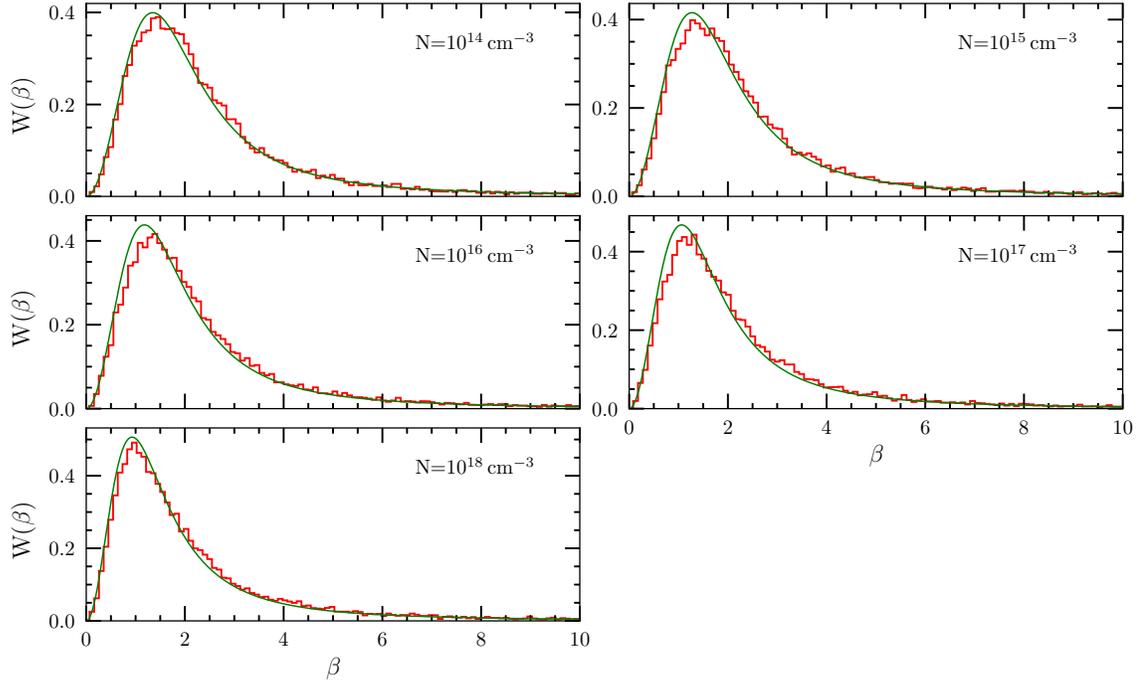
collisions tendra vers un nombre moyen. C'est pour cette raison que Hegerfeldt & Kesting (1988) définissent une fréquence moyenne de collisions  $\nu_R$

$$\nu_R = \sqrt{4\pi} R^2 n v_T, \quad (4.3.8)$$

où  $v_T$  est la vitesse thermique des perturbateurs (calculée avec la masse réduite),  $R$  est le rayon du volume de calcul et  $n$  est la densité en nombre des perturbateurs. Ainsi, le nombre total de perturbateurs  $N$  sur toute la durée de la simulation semble être donné, au premier abord, par

$$N = [\nu_R T + 1/2], \quad (4.3.9)$$

où  $T$  est le temps total de la simulation et [...] dénote la partie entière. Cette équation ne tient cependant pas compte des conditions frontières aux temps  $t = 0$  et  $t = T$ . En d'autres termes, il est possible qu'au début ou à la fin de la simulation, il n'y ait pas de perturbateurs



**Fig. 4.10.** Même chose que la figure 4.9 (25,000 volumes de simulation) mais pour une seule température de 20,000 K et des densités de particules entre  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  et  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

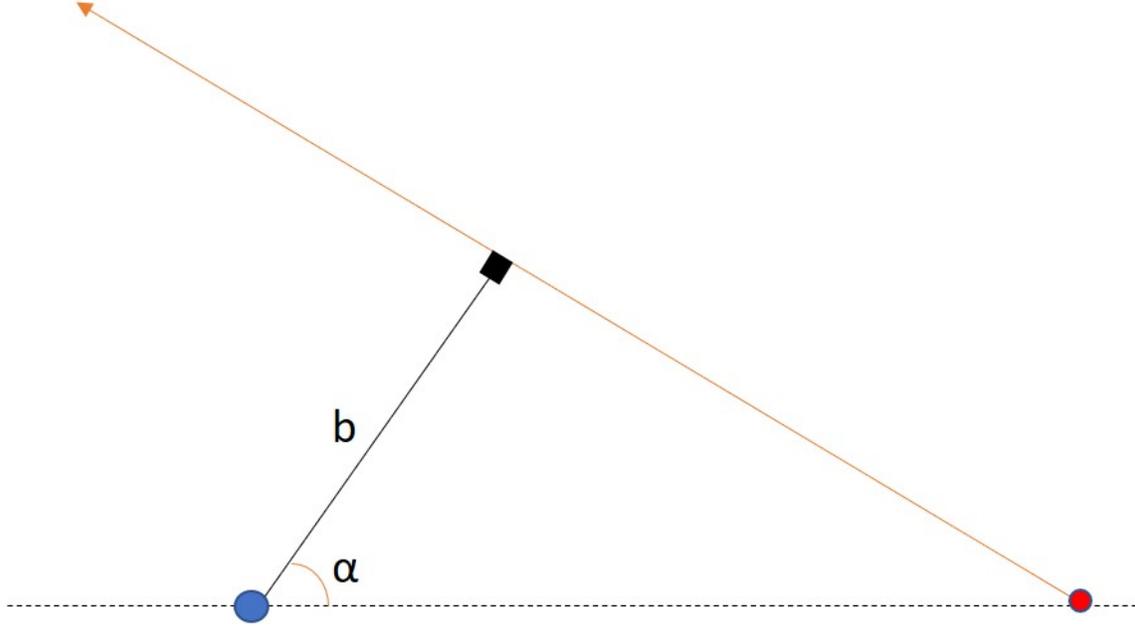
dans le volume de calcul. Pour corriger ce problème, Hegerfeldt & Kesting (1988) proposent un temps de «thermalisation»  $\Delta$

$$\Delta = \frac{10}{\omega_p} = \frac{10}{\sqrt{ne^2/m}}, \quad (4.3.10)$$

où  $m$  est la masse du perturbateur et  $\omega_p$  est la fréquence de plasma de l'environnement. Il faut alors créer des particules qui sont en dehors du volume de calcul au temps  $t = 0$ , mais qui vont le traverser au cours de la simulation. Le bon nombre de perturbateurs à considérer dans la simulation est alors donné par

$$N = [\nu_R(T + 2\Delta) + 1/2]. \quad (4.3.11)$$

Dans ce volume de simulation, qui contient un grand nombre de perturbateurs à de grandes distances de l'émetteur, ce ne sont pas tous les perturbateurs qui sont inclus dans le calcul du champ électrique. Par contre, la création de particules en dehors du volume de calcul



**Fig. 4.11.** Illustration des nouvelles coordonnées caractérisant la position des particules nécessaire dans le cadre du système d'axes d'impact. Le vecteur  $\mathbf{b}$  est perpendiculaire à la trajectoire de la particule.

du champ assure que la densité de l'espace simulé est globalement constante. Ce modèle permet tout de même une variation locale de la densité dans le volume de calcul du champ électrique, puisque le nombre de perturbateurs contribuant à ce dernier varie dans le temps. Cet effet est important dans la simulation parce que l'interaction électrique a une longue portée.

Pour une densité spatiale uniforme et une distribution maxwellienne des vitesses, le nombre de particules par unité de volume dans l'espace de phase satisfait l'équation suivante

$$f(\phi, \theta, v, \alpha, t_0, b) d\phi d\theta dv d\alpha dt_0 db \propto e^{-v^2/v_T^2} d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v}, \quad (4.3.12)$$

où  $v_T$  est la vitesse thermique des particules,  $d^3\mathbf{v}$  est l'élément infinitésimal de vitesse en trois dimensions défini par les coordonnées sphériques (équation 4.3.7), avec la grandeur de la vitesse interprétée comme un rayon

$$d^3\mathbf{v} = v^2 \sin \theta d\phi d\theta dv, \quad (4.3.13)$$

et  $d^3\mathbf{r}$  est l'élément infinitésimal de position exprimé avec les coordonnées du système d'impact en se basant sur l'équation 4.3.6

$$\begin{aligned} d^3\mathbf{r} &= \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial (b, t_0, \alpha)} \right| d\alpha dt_0 db \\ &= \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial b} \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t_0} \times \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \alpha} \right) \right| d\alpha dt_0 db \\ d^3\mathbf{r} &= bv d\alpha dt_0 db. \end{aligned} \quad (4.3.14)$$

En insérant les équations 4.3.13 et 4.3.14 dans l'équation 4.3.12, la fonction de densité dans l'espace de phase du système d'axes d'impact s'exprime

$$f(\alpha, t_0, b, \phi, \theta, v) \propto bv^3 e^{-v^2/v_T^2} \sin \theta. \quad (4.3.15)$$

Les six variables sont statistiquement indépendantes parce que la densité de probabilité est séparable et que leurs bornes inférieures et supérieures respectives ne dépendent pas de la valeur des autres variables. Ceci permet d'appliquer la procédure de génération de nombres aléatoires discutée pour chaque variable. Certaines d'entre elles ne sont pas explicitement présentes dans la fonction de densité, ce qui simplifie la dérivation de leur fonction. Pour l'angle  $\phi$ , défini entre 0 et  $2\pi$ , nous obtenons

$$\begin{aligned} F(\phi) &= \frac{\int_0^\phi d\phi'}{\int_0^{2\pi} d\phi'} = \frac{\phi}{2\pi} \\ \gamma_\phi &= \frac{\phi}{2\pi} \\ \phi &= 2\pi\gamma_\phi, \end{aligned} \quad (4.3.16)$$

et pour  $\alpha$

$$\alpha = 2\pi\gamma_\alpha. \quad (4.3.17)$$

Le temps avant la collision  $t_0$  est aussi absent de la fonction de densité et ses bornes dépendent du nouveau temps de thermalisation de l'environnement. Le temps  $t_0$  est alors décrit par la fonction suivante

$$\begin{aligned} F(t_0) &= \frac{\int_{-\Delta}^{t_0} dt'_0}{\int_{-\Delta}^{T+\Delta} dt'_0} = \frac{t_0 + \Delta}{T + 2\Delta} \\ \gamma_{t_0} &= \frac{t_0 + \Delta}{T + 2\Delta} \\ t_0 &= \gamma_{t_0}(T + 2\Delta) - \Delta. \end{aligned} \quad (4.3.18)$$

Les trois autres coordonnées sont des arguments de la fonction de densité, ce qui rend leur dérivation légèrement plus complexe. La coordonnée  $\theta$  s'exprime de la même façon qu'avec le système d'axes sphériques, c'est-à-dire par l'équation 4.3.3, puisque la contribution de cette coordonnée à la fonction de densité est la même. Le paramètre d'impact  $b$ , dans son cas, est exprimé en fonction du rayon du volume d'exclusion et du rayon du volume de calcul

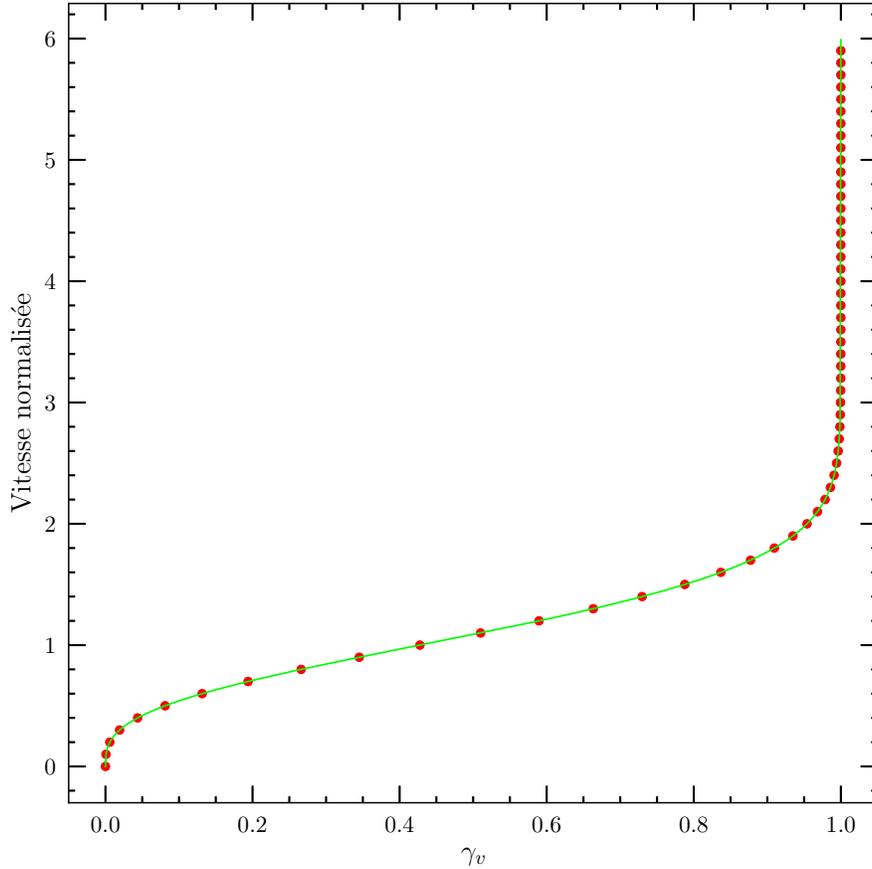
$$\begin{aligned}
F(b) &= \frac{\int_{b_{\min}}^b b' db'}{\int_{b_{\min}}^{b_{\max}} b' db'} = \frac{b^2 - b_{\min}^2}{b_{\max}^2 - b_{\min}^2} \\
\gamma_b &= \frac{b^2 - b_{\min}^2}{b_{\max}^2 - b_{\min}^2} \\
b &= [\gamma_b(b_{\max}^2 - b_{\min}^2) + b_{\min}^2]^{1/2},
\end{aligned} \tag{4.3.19}$$

où  $b_{\max}$  est 3 fois le rayon de Debye et  $b_{\min}$  est de l'ordre du rayon de Bohr.

Pour sa part, la coordonnée de vitesse ne peut pas s'exprimer par une fonction analytique dû à sa contribution à la fonction de densité

$$\begin{aligned}
F(v) &= \frac{\int_0^v v'^3 e^{-v'^2/v_T^2} dv'}{\int_0^\infty v'^3 e^{-v'^2/v_T^2} dv'} \\
u &= v'^2/v_T^2 \quad du = 2v'/v_T^2 dv' \\
F(u) &= \frac{\int_0^{v'^2/v_T^2} u e^{-u} du}{\int_0^\infty u e^{-u} du} \\
a &= u \quad db = e^{-u} du \\
da &= du \quad b = -e^{-u} \\
F(u) &= \frac{-u e^{-u} \Big|_0^{v'^2/v_T^2} + \int_0^{v'^2/v_T^2} e^{-u} du}{-u e^{-u} \Big|_0^\infty + \int_0^\infty e^{-u} du} \\
&= -\frac{v'^2}{v_T^2} e^{-v'^2/v_T^2} + 1 - e^{-v'^2/v_T^2} \\
\gamma_v &= 1 - \left(1 + v'^2/v_T^2\right) e^{-v'^2/v_T^2}.
\end{aligned} \tag{4.3.20}$$

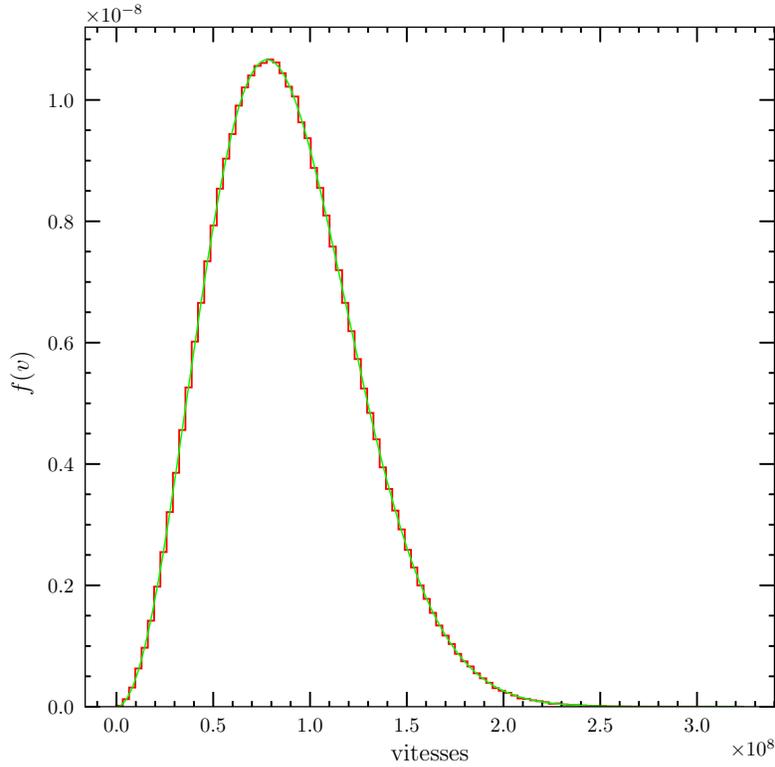
La forme finale de l'équation 4.3.20 est impossible à inverser analytiquement pour exprimer directement la vitesse  $v$  en fonction de  $\gamma_v$ . Une procédure numérique est alors nécessaire. Une table de valeurs doit être générée mettant en relation ces deux quantités. La seule condition est de produire une grille assez fine afin de bien représenter le comportement de



**Fig. 4.12.** Représentation de l’interpolation (ligne pleine verte) de la grille décrite par l’équation 4.3.20 (points rouges) pour l’intervalle de valeurs de  $\gamma_v$  possibles.

l’équation 4.3.20. Une interpolation de la grille permet de produire la fonction numérique inverse, tel qu’illustré à la figure 4.12. Si la procédure n’est pas appliquée correctement, la distribution maxwellienne des vitesses ne sera pas reproduite lorsque l’ensemble des perturbateurs des volumes de simulation sont considérés. La figure 4.13 compare la distribution théorique et la distribution obtenue numériquement à l’aide de l’équation 4.3.20, et permet de valider la procédure de génération des vitesses dans la simulation.

Le prochain test permet de confirmer que la distribution des perturbateurs dans l’espace et en vitesse est isotrope à l’aide des équations 4.3.16 à 4.3.20. La vérification de l’isotropie de la distribution spatiale revient à celle du champ électrique, puisqu’il est produit par les perturbateurs. En jumelant le vecteur de champ électrique avec une dizaine de vecteurs



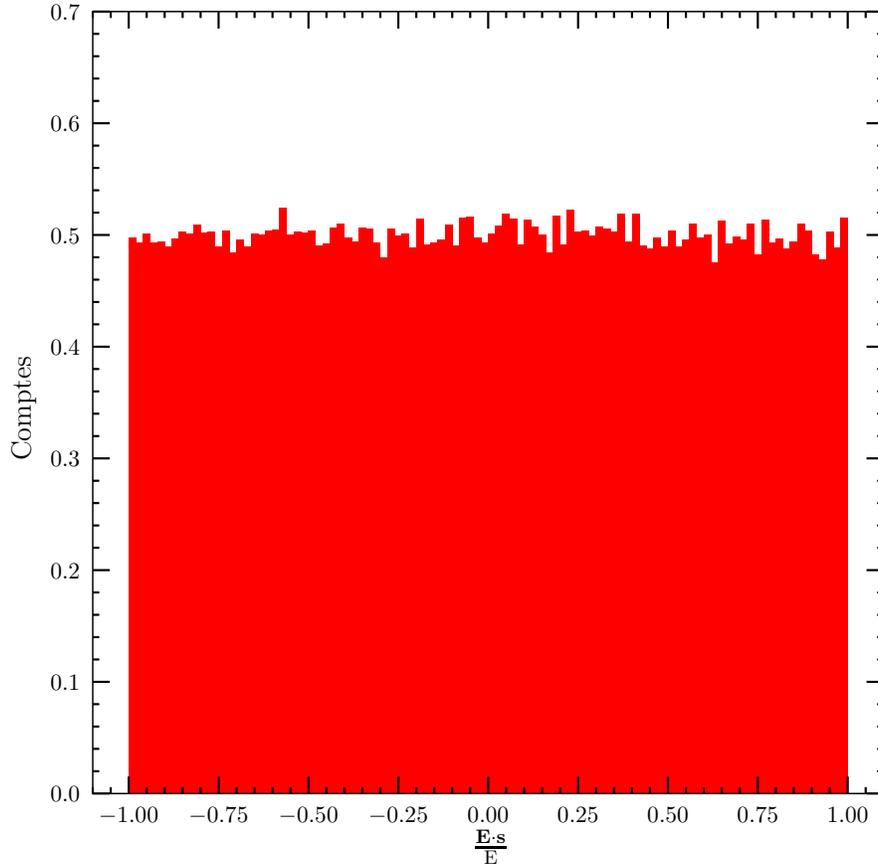
**Fig. 4.13.** Comparaison de la distribution maxwellienne des vitesses théorique (ligne pleine) et celle obtenue numériquement durant la construction de notre espace (histogramme rouge). La distribution attendue est correctement reproduite.

unitaires  $\mathbf{s}$  d'orientation aléatoire, la quantité

$$\frac{\mathbf{F} \cdot \mathbf{s}}{\|\mathbf{F}\|}$$

doit former une distribution uniforme entre  $-1$  et  $1$  en considérant tous les volumes de simulation, et ce, peu importe les conditions physiques du système si l'espace est isotrope. La figure 4.14 démontre que la génération de particules respecte la condition d'isotropie. En vérifiant de la même manière cette condition pour la vitesse, nous arrivons à la même conclusion quant à l'isotropie de l'espace.

Même si ce système d'axes est très utile pour générer des particules en mouvement, elle a pour défaut de nécessiter beaucoup d'espace mémoire. En effet, pour qu'une simulation soit applicable au calcul de profils de raie, il est nécessaire d'avoir un temps de simulation assez long. En augmentant ce temps, le volume de simulation de Hegerfeldt & Kesting (1988) ne fait que croître en raison du critère de l'équation 4.3.11. Ainsi, le nombre de particules



**Fig. 4.14.** Représentation de l’isotropie de l’orientation du champ électrique central pour des températures variables, une densité fixe et 30000 espaces générés. Le test a été effectué à l’aide d’une dizaine de vecteurs unitaires d’orientations aléatoires.

dont il faut suivre la trajectoire est beaucoup plus grand que le nombre de particules effectivement présentes dans le volume de calcul et contribuant au champ électrique. Une approche alternative est nécessaire afin de réduire l’espace mémoire nécessaire pour produire la simulation.

#### 4.3.2.2. *Approche de Gigoso*

Gigoso & Cardenoso (1996) proposent une méthode qui comprend une initialisation et une procédure de réinjection de particules afin de limiter le volume de simulation. Des particules sont initialement disposées dans une sphère de rayon  $R$ . Par la suite, lorsque certaines particules quittent le volume, elles sont remplacées par de nouvelles, qui apparaissent à la

surface de la sphère et poursuivent leur trajet à l'intérieur de la sphère. Certaines d'entre elles pourront même quitter la sphère.

Lors de l'initialisation du volume de simulation à  $t = 0$ , la position et la vitesse des particules s'expriment avec les mêmes 6 coordonnées que dans l'équation 4.3.15, que nous reproduisons ici

$$f(\alpha, t_0, b, \phi, \theta, v) \propto bv^3 e^{-v^2/v_T^2} \sin \theta. \quad (4.3.21)$$

Cependant, à l'inverse du modèle de Hegerfeldt & Kesting (1988), les coordonnées, lors de l'initialisation, doivent satisfaire une contrainte elle-même fonction de trois des coordonnées

$$|\mathbf{r}|^2 = b^2 + v^2 t_0^2 \leq R^2 \quad (4.3.22)$$

puisque les particules doivent se trouver à l'intérieur de la sphère. Cette condition s'exprime de manière équivalente par une contrainte sur  $t_0$

$$|t_0| \leq t_{0,\max} \quad (4.3.23)$$

où  $t_{0,\max}$  est la moitié du temps que prend une particule en mouvement rectiligne pour traverser la sphère de rayon  $R$ , soit

$$t_{0,\max} = \frac{\sqrt{R^2 - b^2}}{v}, \quad (4.3.24)$$

qui est une fonction de la vitesse  $v$  et du paramètre d'impact  $b$ .

En raison de la contrainte 4.3.23, les variables  $b$ ,  $v$  et  $t_0$  ne sont plus indépendantes et il faut en tenir compte lors de la génération aléatoire des coordonnées initiales des particules. Considérons la distribution de ces 3 variables

$$f(t_0, b, v) \propto bv^3 e^{-v^2/v_T^2}. \quad (4.3.25)$$

Elle peut être représentée par le produit suivant de distributions conditionnelles, une par variable,

$$f(t_0, b, v) = f_t(t_0|b, v) f_b(b|v) f_v(v) \quad (4.3.26)$$

où le symbole  $|$  signifie «étant donné». La distribution  $f$  à 3 variables est donc le produit de celle de  $t_0$  (avec  $b$  et  $v$  connus), de  $b$  (avec  $v$  connu) et de  $v$ .

Puisque la forme de  $f(t_0, b, v)$  ne dépend pas de  $t_0$ , cette variable est uniforme (étant données  $b$  et  $v$ ), entre ses deux limites  $\pm t_{0,\max}$ , et

$$f_t(t_0|b, v) = \frac{1}{2t_{0,\max}} = \frac{v}{2\sqrt{R^2 - b^2}}. \quad (4.3.27)$$

En substituant ce résultat dans 4.3.26, on trouve que

$$f_b(b|v) \propto b\sqrt{R^2 - b^2}, \quad (4.3.28)$$

une expression indépendante de  $v$ ; ceci signifie que  $b$  et  $v$  peuvent être générées indépendamment et que  $f_b(b|v) \equiv f_b(b)$ . Finalement, en combinant les deux précédents résultats, on retrouve la distribution de Maxwell-Boltzmann

$$f_v(v) \propto v^2 e^{-v^2/v_T^2}. \quad (4.3.29)$$

La génération aléatoire des 3 autres coordonnées ne subit pas de changement :

$$\phi = 2\pi\gamma_\phi \quad (4.3.30)$$

$$\theta = \arccos(1 - 2\gamma_\theta) \quad (4.3.31)$$

$$\alpha = 2\pi\gamma_\alpha. \quad (4.3.32)$$

L'équation 4.3.26 sert de point départ pour générer les trois autres variables,  $t_0$ ,  $b$  et  $v$ . Il est important de produire ces variables dans le bon ordre afin de bien traiter leur dépendance mutuelle emmenée par la condition frontière de la simulation (équation 4.3.23). Il faut d'abord définir la coordonnée de vitesse puisque sa distribution ne dépend pas des coordonnées  $t_0$  et  $b$  (équation 4.3.29)

$$\begin{aligned} F(v) &= \frac{\int_0^v f_v(y) dy}{\int_0^\infty f_v(y) dy} \\ F(v) &= \frac{\int_0^v y^2 e^{-y^2/v_T^2} dy}{\int_0^\infty y^2 e^{-y^2/v_T^2} dy} \\ u &= \frac{y}{v_T} \quad du = \frac{dy}{v_T} \\ F(v) &= \frac{\int_0^{v/v_T} u^2 e^{-u^2} du}{\int_0^\infty u^2 e^{-u^2} du}. \end{aligned}$$

où il faut effectuer une intégration par partie et un changement de variable d'intégration

$$k = u^2 \quad dl = e^{-u^2} du$$

$$dk = 2u du \quad l = \int_0^u e^{-t^2} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(u),$$

avec  $\operatorname{erf}(u)$ , la fonction erreur, ce qui donne finalement la forme suivante

$$F(v) = \frac{\left(u^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(u)\right)\Big|_0^{v/v_T} - \sqrt{\pi} \int_0^{v/v_T} u \operatorname{erf}(u) du}{\left(u^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(u)\right)\Big|_0^{\infty} - \sqrt{\pi} \int_0^{\infty} u \operatorname{erf}(u) du}. \quad (4.3.33)$$

Pour résoudre l'intégrale de la fonction erreur, nous avons utilisé un outil d'intégration numérique. Le résultat est le suivant

$$\int u \operatorname{erf}(u) du = \frac{1}{4} \left( (2u^2 - 1) \operatorname{erf}(u) + \frac{2ue^{-u^2}}{\sqrt{\pi}} \right) + C, \quad (4.3.34)$$

où  $C$  est une constante d'intégration. En substituant ce résultat dans l'équation 4.3.33, nous trouvons

$$\begin{aligned} F(v) &= \frac{\left(u^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(u)\right)\Big|_0^{v/v_T} - \frac{1}{4} \left( (2u^2 - 1) \operatorname{erf}(u) + \frac{2ue^{-u^2}}{\sqrt{\pi}} \right)\Big|_0^{v/v_T}}{\left(u^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(u)\right)\Big|_0^{\infty} - \frac{1}{4} \left( (2u^2 - 1) \operatorname{erf}(u) + \frac{2ue^{-u^2}}{\sqrt{\pi}} \right)\Big|_0^{\infty}} \\ &= \frac{\left(\operatorname{erf}(u) - \frac{2ue^{-u^2}}{\sqrt{\pi}}\right)\Big|_0^{v/v_T}}{\left(\operatorname{erf}(u) - \frac{2ue^{-u^2}}{\sqrt{\pi}}\right)\Big|_0^{\infty}} \\ &= \operatorname{erf}(u) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} ue^{-u^2}, \end{aligned} \quad (4.3.35)$$

où  $u = v/v_T$  (à la dernière ligne) afin d'alléger la forme finale de l'équation.

La forme de  $F(v)$  ne permet pas d'effectuer l'inversion analytique nécessaire pour générer la vitesse d'une particule à partir d'une fonction de distribution uniforme entre 0 et 1. Ici, nous adoptons la méthode d'inversion numérique présentée à la section 4.2. En ayant maintenant généré la coordonnée de vitesse, il est nécessaire de déterminer le paramètre d'impact (équation 4.3.28)

$$\begin{aligned} F(b) &= \frac{\int_0^b f_b(y) dy}{\int_0^R f_b(y) dy} \\ F(b) &= \frac{\int_0^b y \sqrt{R^2 - y^2} dy}{\int_0^R y \sqrt{R^2 - y^2} dy} \\ u &= R^2 - y^2 \quad du = 2y dy \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F(b) &= \frac{\int_{R^2}^{R^2-b^2} \sqrt{u} du}{\int_{R^2}^0 \sqrt{u} du} \\
\gamma_b &= \frac{(R^2 - b^2)^{3/2} - R^3}{-R^3} \\
b &= R(1 - (1 - \gamma_b)^{2/3})^{1/2}.
\end{aligned} \tag{4.3.36}$$

Cette équation décrit le paramètre d'impact d'une particule sans tenir compte du volume d'exclusion autour de l'émetteur. Il faudra alors générer une nouvelle valeur de la coordonnée lorsque le paramètre d'impact sera plus petit que le rayon d'exclusion. Cette procédure est due à la méthode de réinjection qui sera expliquée plus bas.

Connaissant maintenant les coordonnées  $v$  et  $b$ , la coordonnée  $t_0$  est maintenant contrainte (équation 4.3.23) par un  $t_{0,\max}$  constant (équation 4.3.24). Nous pouvons alors générer une coordonnée aléatoire pour  $t_0$  en utilisant l'équation 4.3.27, sachant que  $t_{0,\max}$  est une constante

$$\begin{aligned}
F(t_0) &= \frac{\int_{-t_{0,\max}}^{t_0} f_t(t|b,v) dt}{\int_{-t_{0,\max}}^{t_{0,\max}} f_t(t|b,v) dt} \\
F(t_0) &= \frac{\int_{-t_{0,\max}}^{t_0} dt}{\int_{-t_{0,\max}}^{t_{0,\max}} dt} \\
\gamma_{t_0} &= \frac{t_0 + t_{0,\max}}{2t_{0,\max}} \\
t_0 &= \gamma_{t_0}(2t_{0,\max}) - t_{0,\max}.
\end{aligned} \tag{4.3.37}$$

Grâce aux équations 4.3.30 à 4.3.37, il est maintenant possible de générer la position initiale et le vecteur vitesse des perturbateurs dans le volume de simulation. Il ne reste plus qu'à décrire correctement les particularités de l'évolution temporelle du système, dont la réinjection des perturbateurs, un concept important que nous décrivons en détail dans le reste de cette section.

Puisque le volume de simulation est fini, certains perturbateurs sortiront du volume pendant la simulation. Afin de respecter les statistiques du système tout au long de l'évolution temporelle, il est important d'introduire un nouveau perturbateur dans le volume de simulation lorsqu'un perturbateur quitte ce volume, à l'aide d'une bonne technique dite de réinjection. Cette opération est plus complexe que la simple création d'une nouvelle particule dans le volume de simulation. En effet, les équations ont été dérivées afin de reproduire

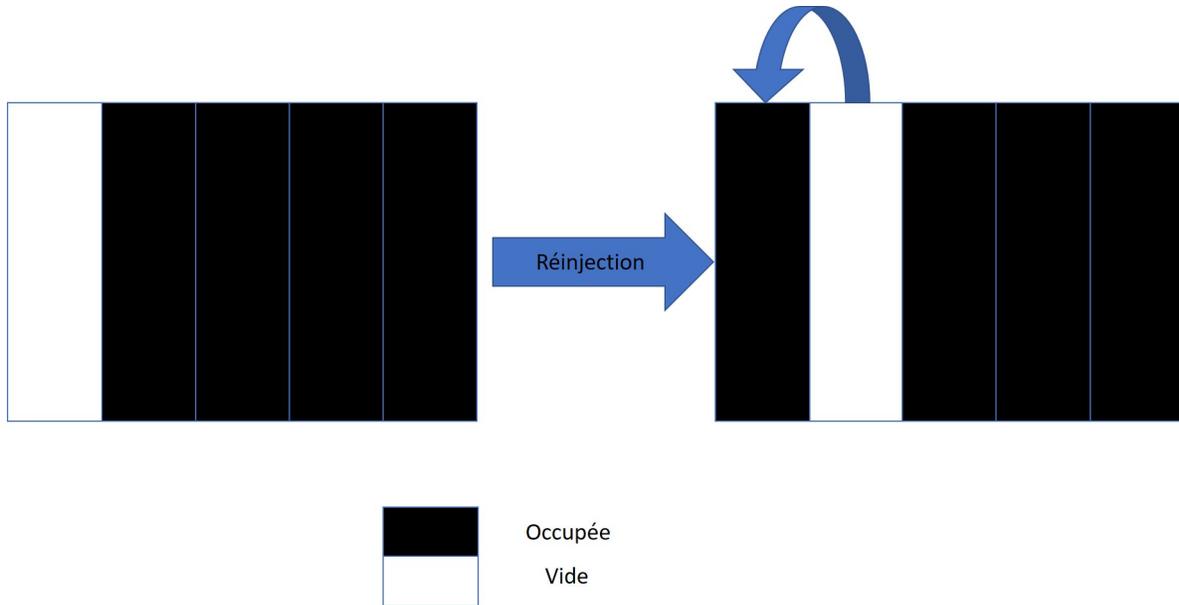
la statistique d'un système global évoluant dans un temps limité, mais la simulation doit pouvoir se poursuivre pendant un temps de notre choix. En plus, ce perturbateur ne peut être placé à une position arbitraire. Il doit obligatoirement se trouver sur la surface externe du volume de simulation, et donc à un  $t_0$  fixe égal à  $t_{0,\max}$ , tel que défini à l'équation 4.3.24. Ce perturbateur peut se retrouver n'importe où sur cette surface et les équations 4.3.30 et 4.3.31, utilisées pour générer une position angulaire aléatoire sur la surface de la sphère du volume de simulation, demeurent donc valides.

La complexité de la réinjection vient avec l'obligation de distinguer le nouveau perturbateur de celui qui a quitté le volume. En effet, il ne suffit pas que le nouveau perturbateur ait la même vitesse et le même paramètre d'impact que l'ancienne particule, même si cela permet de conserver la statistique du système. Cette approche introduirait un signal périodique artificiel même si la statistique du système est respectée. Pour éviter ce problème, il faut adopter une méthode qui conserve la statistique du système tout en empêchant une corrélation entre les nouveaux perturbateurs et ceux qui ont quitté le volume de simulation. La méthode proposée par Gigoso & Cardenoso (1996) repose sur une modification du processus de génération de nombres aléatoires pour la vitesse et le paramètre d'impact. Dans le cas du paramètre d'impact, chaque particule se voit attribuer une case d'indice  $k$ , dans l'intervalle (0,1) délimitée par les valeurs  $b_{k-1}$  et  $b_k$  tels que

$$\begin{aligned} F(b_{k-1}) &= (k-1)/N \\ F(b_k) &= k/N \end{aligned} \tag{4.3.38}$$

où  $N$  est le nombre de particules totales et  $k$  est le «numéro» de la particule ( $k=1$  à  $k=N$ ) pour les deux coordonnées. La valeur associée au nombre aléatoire de chacune des cases est attribuée à la coordonnée selon la distribution cumulative  $F$  (équations 4.3.36 et 4.3.35). En divisant la fonction de distribution uniforme en  $N$  cases distinctes, il est possible d'attribuer une case à chaque perturbateur. Cette méthode différente d'allocation de la valeur du paramètre d'impact et de vitesse (des cases sont utilisées au lieu d'une approche complètement aléatoire) ne change rien au respect des distributions attendues.

Toutefois, cela n'est pas encore suffisant pour assurer l'indépendance entre les anciennes et les nouvelles particules du système, puisque les valeurs de vitesse et de paramètre d'impact demeureront toujours similaires d'une réinjection à l'autre. Pour éviter cette situation, Gigoso & Cardenoso (1996) modifie leur méthode, pour la vitesse uniquement, et séparent



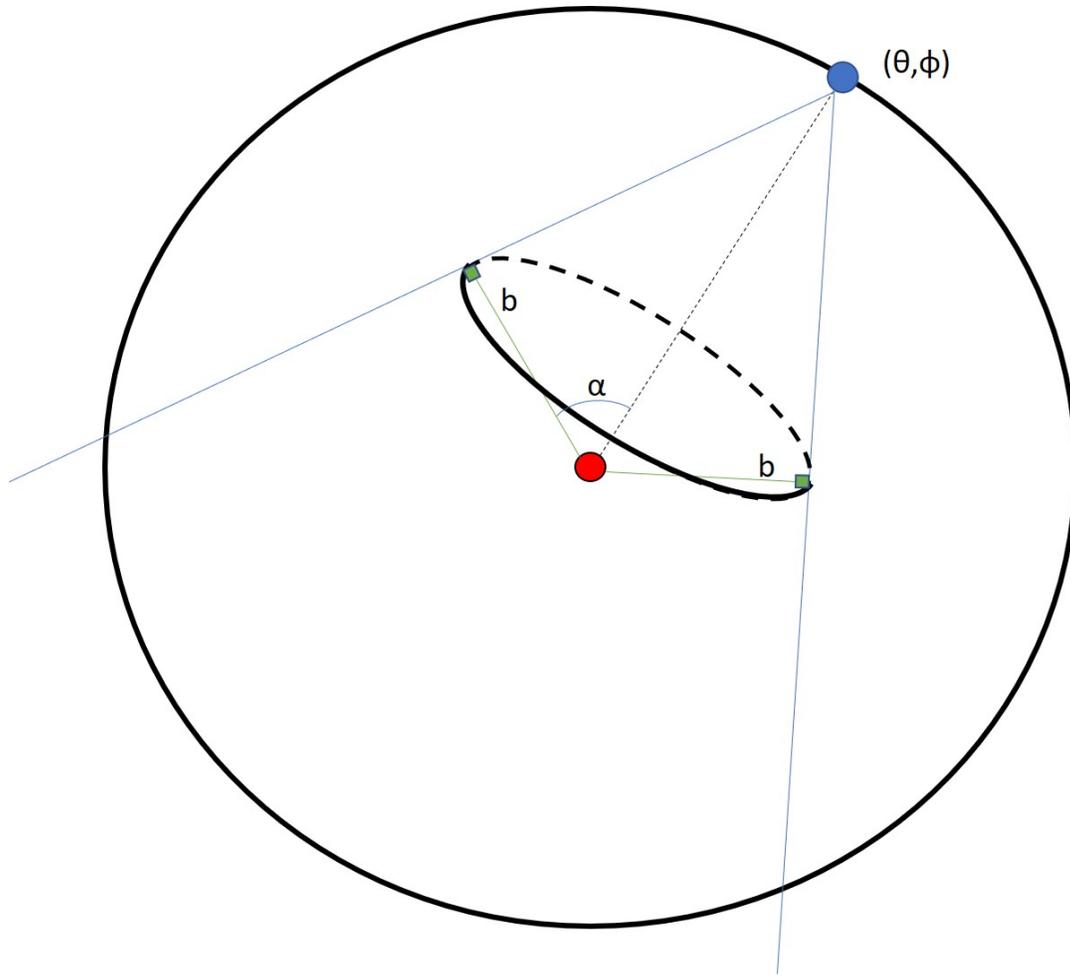
**Fig. 4.15.** Représentation de l’attribution d’une nouvelle case de valeur pour la coordonnée de vitesse lors de la réinjection. L’ancienne case occupée devient vide pour prendre la place de l’ancienne case vide. Cela assure un cycle de différentes vitesses pour une même case de paramètre d’impact.

la distribution uniforme générant la coordonnée de vitesse en  $N + 1$  cases dont une vide, donc sans particule ayant une vitesse dans cet intervalle. L’ajout de cette case vide permet de conserver la forme globale de la distribution maxwellienne des vitesses, tout en permettant à une nouvelle particule d’occuper une case précédemment inoccupée, afin d’obtenir une case différente de vitesse. Donc la particule d’indice  $k$  se voit attribuer une case d’indice  $c_k$  entre 1 et  $N + 1$ , et une vitesse dans l’intervalle

$$\begin{aligned}
 F(v_{c_{k-1}}) &= (c_{k-1}) / (N + 1) \\
 F(v_{c_k}) &= c_k / (N + 1) .
 \end{aligned}
 \tag{4.3.39}$$

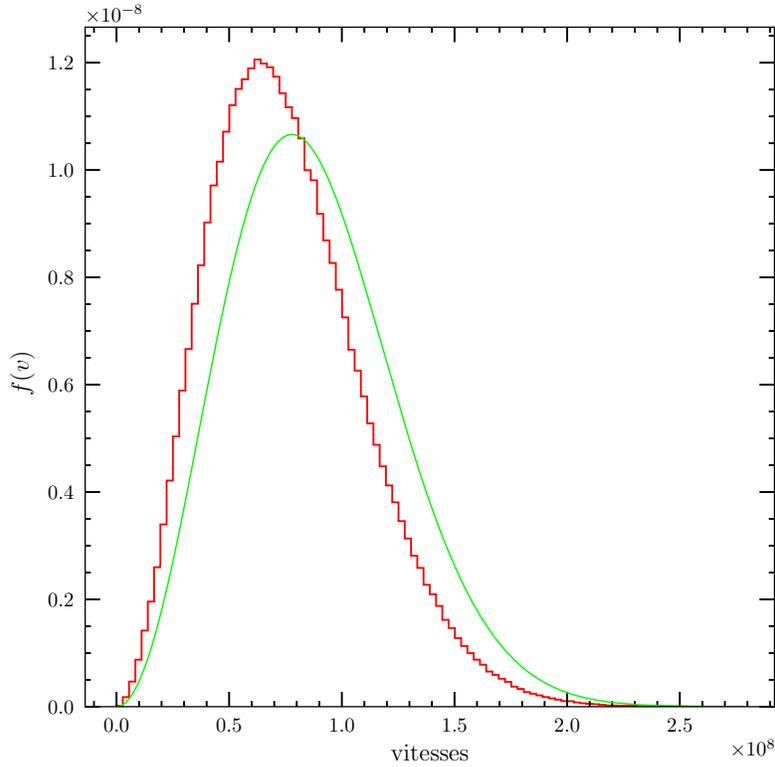
La figure 4.15 représente le processus numérique de réinjection pour la vitesse. Pour le paramètre d’impact, la réinjection se produit à l’intérieur d’une même case.

La valeur de la coordonnée  $\alpha$  définit une droite sur la surface d’un cône ayant comme apex les coordonnées  $R$ ,  $\theta$  et  $\phi$ . La coordonnée  $\alpha$  oriente le vecteur d’impact dans l’espace selon le système d’axes (voir figure 4.16). Il n’y a pas de contrainte sur cette coordonnée lors de la réinjection et l’équation 4.3.32 demeure donc valide pour définir une nouvelle coordonnée pour la particule.



**Fig. 4.16.** Ensemble des points d'impact possibles pour une coordonnée  $b$  (formant le cercle centrale). Chaque point d'impact est déterminé par un seul angle  $\alpha$  et détermine donc une seule trajectoire ayant une orientation donnée. L'ensemble des trajectoires possibles forment la surface d'un cône.

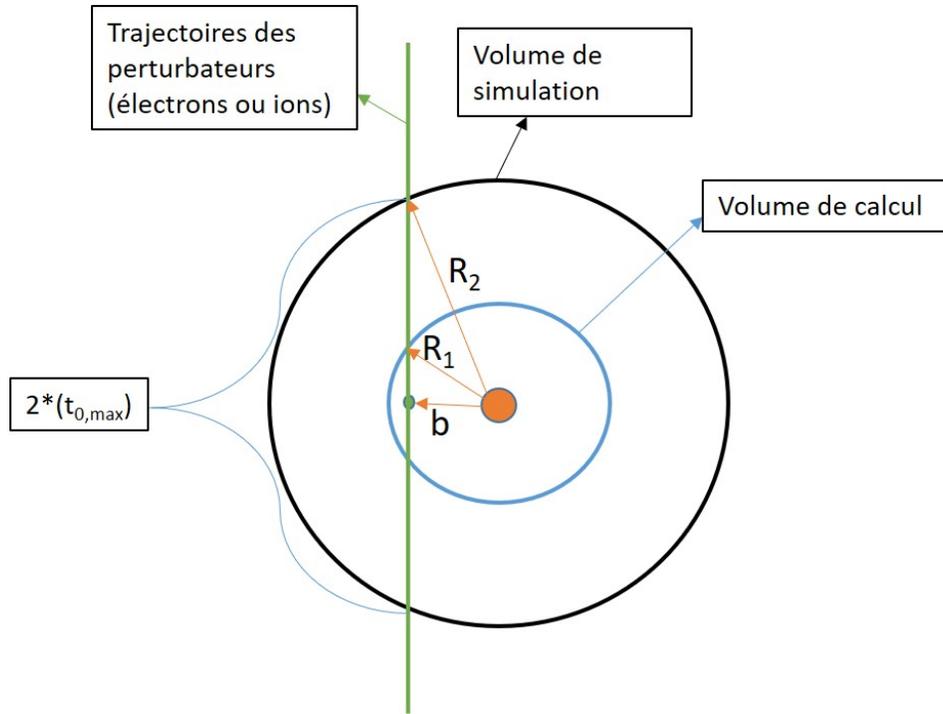
La réinjection d'une nouvelle particule est cruciale pour que la situation représente le comportement du système le plus fidèlement possible pendant l'entière durée de la simulation. Une mauvaise réinjection peut causer une déviation progressive des propriétés statistiques du système. Il existe deux types de mauvaise réinjection : une pour laquelle la statistique est toujours respectée mais la réinjection ne représente pas une situation physique (par exemple, l'apparition soudaine d'une particule au coeur du volume) et l'autre où la statistique du système n'est plus respectée. Heureusement, il est facile de repérer ces types de réinjections puisque, dans le premier cas, une simple recherche sur le comportement de l'environnement étudié permet d'identifier un aspect non physique de la technique employée. Pour le second,



**Fig. 4.17.** Représentation d’une mauvaise réinjection après 500 itérations temporelles du système. Une déviation importante entre les distributions des vitesses simulée (rouge) et théorique (vert) apparaît, qui s’apparente à un refroidissement du plasma.

il est possible de repérer une mauvaise réinjection en analysant la distribution des coordonnées en fonction du temps. Normalement, la statistique du système devrait satisfaire les distributions en tout temps malgré certaines fluctuations mineures, puisque le nombre de particules est fini. Pour une mauvaise réinjection, le type de distribution observée est de la forme illustrée à la figure 4.17, contrairement à celle de la figure 4.13. Le comportement problématique connu (Gigosos & Cardenoso, 1987), ressemble à un refroidissement du plasma dû au déplacement du pic de la distribution vers des vitesses plus faibles.

Cette technique de réinjection permet de respecter correctement les conditions frontières de l’environnement simulé. Toutefois, la méthode de Gigosos & Cardenoso (1996) néglige l’aspect de la variation locale de la densité qu’apportait la théorie de Hegerfeldt & Kesting (1988). Nous combinons ces deux méthodes à la prochaine section.

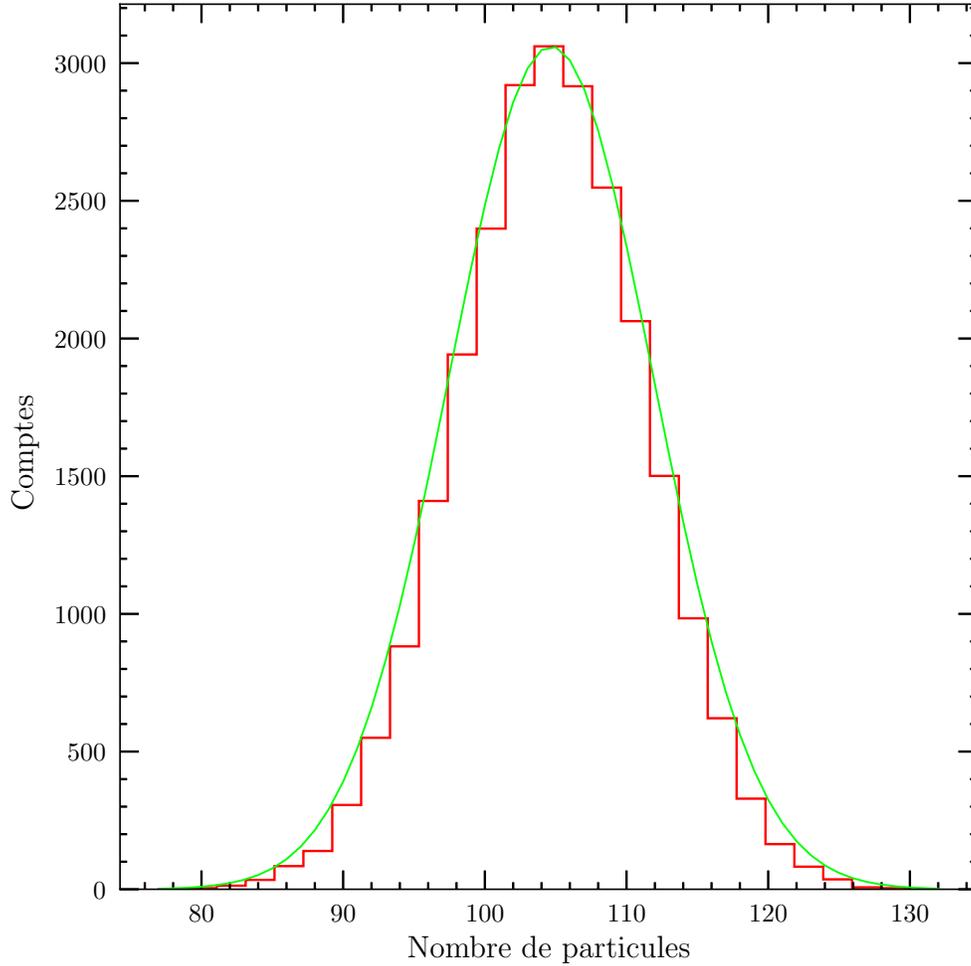


**Fig. 4.18.** Représentation du volume de simulation adoptée. Le volume de simulation, qui est de rayon  $R_2$ , comprend un volume de rayon  $R_1$  qui est celui défini dans la méthode de Gigosos. L'usage de deux rayons permet de représenter la variation locale du nombre de particules dans le volume de rayon  $R_1$ .

#### 4.3.2.3. Méthode hybride

Nous avons adopté une méthode qui combine les avantages des deux méthodes discutées, soit la variation de densité locale introduite par Hegerfeldt & Kesting (1988) et la procédure de réinjection de Gigosos. L'espace est divisé en deux sphères (voir figure 4.18): un volume de simulation de rayon  $R_2$  comprenant un volume de calcul de rayon  $R_1 < R_2$ . Le rayon  $R_1$  est équivalent à celui du volume de simulation de Gigosos, défini à la section précédente. L'ensemble des perturbateurs présents dans le volume de rayon  $R_2$  se déplacent mais seuls ceux dans le volume de rayon  $R_1$  contribuent au champ électrique à la position de l'émetteur. La présence d'une seconde sphère, plus grande, ne change pas la définition des variables du système d'axes.

La seule différence est le remplacement de  $R$ , le rayon du volume de Gigosos, par  $R_2$ . La présence de la seconde sphère augmente le nombre de particules à traiter dans la simulation



**Fig. 4.19.** Distribution du nombre d’espaces simulés ayant un certain nombre de particules dans son volume de calcul (rouge) comparée à la distribution de Poisson (vert) paramétrée par le nombre moyen de particules dans le volume de calcul.

mais assure que le nombre variable de particules présentes dans le volume de rayon  $R_1$  suit une distribution de Poisson (voir la figure 4.19), ce que ne permet pas la méthode de Gigosos.

Nous disposons maintenant d’un moyen pour générer un volume de simulation dans lequel des particules sont produites à l’aide du système d’axes d’impact. En combinant la méthode de Gigosos et de Hegerfeldt, nous nous sommes assurés que l’isotropie de l’espace soit respectée, en plus de la statistique de vitesses et de champs électriques. La prochaine étape consiste à valider l’ensemble des outils employés dans la simulation pour produire la fonction d’autocorrélation et pour effectuer la transformée de Fourier avant de générer de

nouveaux profils de raies. Pour ce faire, nous traiterons au prochain chapitre le cas quasi-statique.

# Chapitre 5

---

## Modèle quasi-statique

Dans ce chapitre, nous nous concentrons sur la transition  $2P^3 - 4D^3$  (He I  $\lambda 4471$ ) de l'atome d'hélium afin de fournir un exemple de la procédure de calcul d'un profil quasi-statique qui comprend trois étapes:

- (1) Le calcul des vecteurs et valeurs propres de la matrice  $\Omega$  (équation 2.3.11) pour différents champs électriques.
- (2) Le calcul de la fonction d'autocorrélation moyennée sur un ensemble de configurations statiques de perturbateurs (équation 3.3.10).
- (3) La transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation (discutée plus en détail à l'annexe A).

Nous allons par la suite montrer que cette procédure est générale à l'aide de la transition  $2P^1 - 4D^1$  (He I  $\lambda 4922$ ). Ces deux transitions ont été choisies à cause de leur importance dans le spectre des naines blanches de type DB.

Dans l'approximation quasi-statique, les effets causés par la variation de l'orientation du champ électrique sont négligés, puisque le vecteur de champ électrique demeure constant dans le temps (Barnard et al., 1974; Griem, 1974). Cela permet de choisir arbitrairement l'orientation du champ électrique de l'espace lors du calcul d'un profil quasi-statique. En raison des propriétés de l'opérateur de moment cinétique (Griffiths, 2017), nous choisirons la direction  $z$  pour notre développement initial, puisque la matrice  $\Omega$  aura une forme plus simple, facilitant ainsi la recherche des valeurs propres du système.

## 5.1. Résolution de la matrice de valeurs propres $\Omega$

### 5.1.1. Champ électrique dans la direction $z$

Par ce choix d'orientation du champ électrique, l'équation 2.3.11 peut être réécrite de la manière suivante

$$\Omega_{l'l}^{m'm} \equiv \begin{cases} \frac{e E_z}{\hbar} \langle n \ell m s | \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1,(m-m')} | n \ell' m' s \rangle & \text{si } |\ell - \ell'| = 1 \text{ et } |m - m'| = 0 \\ \omega_{nls} & \text{si } |\ell - \ell'| = 0 \\ 0 & \text{si } |\ell - \ell'| > 1 \text{ ou } |m - m'| \geq 1. \end{cases} \quad (5.1.1)$$

Selon l'équation 5.1.1, la matrice  $\Omega$  devient alors sous une forme dite bloc-diagonale. L'avantage de ce type de matrice est de pouvoir traiter la matrice complète en des sous-matrices de plus petites dimensions. Les valeurs propres ne sont pas différentes si la recherche est faite sur la matrice ou ses sous-matrices, mais elle est largement simplifiée en utilisant les sous-matrices. Pour le cas de la transition  $2P^3 - 4D^3$ , la matrice complète pour un champ électrique le long de l'axe  $z$  s'exprime comme

$$\begin{pmatrix} \omega_3^{-3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_3^{-2} & \Omega_{3,2}^{-2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Omega_{2,3}^{-2} & \omega_2^{-2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega_3^{-1} & \Omega_{3,2}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Omega_{2,3}^{-1} & \omega_2^{-1} & \Omega_{2,1}^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{1,2}^{-1} & \omega_1^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_3^0 & \Omega_{3,2}^0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{2,3}^0 & \omega_2^0 & \Omega_{2,1}^0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{1,2}^0 & \omega_1^0 & \Omega_{1,0}^0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{0,1}^0 & \omega_0^0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_3^1 & \Omega_{3,2}^1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{2,3}^1 & \omega_2^1 & \Omega_{2,1}^1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{1,2}^1 & \omega_1^1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_3^2 & \Omega_{3,2}^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{2,3}^2 & \omega_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_3^3 \end{pmatrix}$$

où  $\omega_\ell^m$  est une contraction de l'expression  $\omega_\ell^m(0) - \omega_\alpha(\boldsymbol{\beta})$ ,  $\omega_\alpha(\boldsymbol{\beta})$  est une valeur propre à déterminer numériquement qui dépend de la valeur du champ électrique normalisée par l'intensité du champ normal  $\beta = |\mathbf{F}|/F_0$  et  $\Omega_{\ell',\ell}^m$  est une forme contractée de l'équation 5.1.1 pour le cas  $m = m'$ .

Selon la forme de cette matrice, les sous-matrices sont décrites par le nombre quantique  $m$ . Ainsi, pour les différents  $m$  possibles en valeur absolue, les sous-matrices sont :

Pour  $|m| = 3$ :

$$\left( \omega_3 - \omega_\alpha \right)$$

Pour  $|m| = 2$ :

$$\begin{pmatrix} \omega_3 - \omega_\alpha & \Omega_{3,2} \\ \Omega_{2,3} & \omega_2 - \omega_\alpha \end{pmatrix}$$

Pour  $|m| = 1$ :

$$\begin{pmatrix} \omega_3 - \omega_\alpha & \Omega_{3,2} & 0 \\ \Omega_{2,3} & \omega_2 - \omega_\alpha & \Omega_{2,1} \\ 0 & \Omega_{1,2} & \omega_1 - \omega_\alpha \end{pmatrix}$$

Pour  $m = 0$ :

$$\begin{pmatrix} \omega_3 - \omega_\alpha & \Omega_{3,2} & 0 & 0 \\ \Omega_{2,3} & \omega_2 - \omega_\alpha & \Omega_{2,1} & 0 \\ 0 & \Omega_{1,2} & \omega_1 - \omega_\alpha & \Omega_{1,0} \\ 0 & 0 & \Omega_{0,1} & \omega_0 - \omega_\alpha \end{pmatrix}$$

En résolvant l'ensemble de ces sous-matrices, les valeurs propres du système complet peuvent être trouvées. Pour la matrice de  $|m| = 3$ , la réponse est triviale, elle est  $\omega_3$ . Ainsi, pour ces nombres quantiques  $m$ , le champ électrique ne peut pas perturber l'état dans l'approximation où on néglige la contribution des niveaux avec  $n$  différents de 4.

Pour la recherche des valeurs propres des autres sous-matrices, un algorithme de recherche numérique est utilisé. Cet algorithme peut facilement trouver les valeurs propres si la matrice est de plus petite dimension. Toutefois, même si cela est plus difficile, il peut aussi le faire pour des matrices de plus grande dimension, soit la matrice 16x16 complète. En guise d'exemple, nous allons obtenir la solution analytique pour la matrice décrite par  $|m| = 2$ .

Il faut d'abord trouver les valeurs propres de cette matrice, qui sont les énergies des composantes des états perturbés. Pour ce faire, le déterminant de la matrice considérée doit être nul

$$\begin{aligned} (\omega_3 - \omega_\alpha)(\omega_2 - \omega_\alpha) - (\Omega_{2,3})^2 &= 0 \\ \omega_\alpha^2 - (\omega_3 + \omega_2)\omega_\alpha + (\omega_2\omega_3 - (\Omega_{2,3})^2) &= 0. \end{aligned} \quad (5.1.2)$$

Cette équation présente deux solutions pour la valeur de  $\omega_\alpha$ , qui sont les deux valeurs propres de la matrice décrite par  $|m| = 2$

$$\begin{aligned} \omega_\alpha &= \frac{\omega_3 + \omega_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(\omega_3 + \omega_2)^2}{4} - \omega_3\omega_2 + (\Omega_{2,3})^2} \\ &= \frac{\omega_3 + \omega_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(\omega_3 - \omega_2)^2}{4} + (\Omega_{2,3})^2} \\ &= \frac{\omega_3 + \omega_2}{2} \pm \frac{(\omega_3 - \omega_2)}{2} \sqrt{1 + 4 \frac{(\Omega_{2,3})^2}{(\omega_3 - \omega_2)^2}} \\ &= \frac{\omega_3 + \omega_2}{2} \pm \frac{(\omega_3 - \omega_2)}{2} \sqrt{1 + 4\epsilon_m^2\beta^2}, \end{aligned} \quad (5.1.3)$$

où  $\epsilon_m$  est donné par l'expression suivante

$$\epsilon_m = \frac{eF_0 \langle 42m | z | 43m \rangle}{\hbar (\omega_3 - \omega_2)}. \quad (5.1.4)$$

Dans le cas où le champ électrique est dans la direction  $z$ , les valeurs de  $m$  et  $m'$  sont identiques pour les éléments de matrice non nuls (voir équation 5.1.1). Afin d'attribuer les deux réponses de l'équation 5.1.3 aux bons états perturbés  $\alpha$ , il faut regarder le comportement des valeurs propres lorsque la valeur du champ électrique devient nulle. En insérant cette condition dans l'équation 5.1.3, chaque état perturbé  $\alpha$  converge vers un des états non perturbés  $\ell$ . Pour  $\alpha = 2$ , l'état tendra vers  $\ell = 2$  et pour  $\alpha = 3$ , il tendra vers  $\ell = 3$ . Ainsi, les énergies des états perturbés sont respectivement données par

$$\omega_2(\beta) = \frac{\omega_3 + \omega_2}{2} - \frac{(\omega_3 - \omega_2)}{2} \sqrt{1 + 4\epsilon_m^2\beta^2}. \quad (5.1.5)$$

$$\omega_3(\beta) = \frac{\omega_3 + \omega_2}{2} + \frac{(\omega_3 - \omega_2)}{2} \sqrt{1 + 4\epsilon_m^2\beta^2}. \quad (5.1.6)$$

À l'aide des valeurs propres de l'équation 5.1.3, le système d'équations 2.3.12 peut être résolu pour décrire les coefficients  $C_{\ell,\alpha}$ . Ils permettent de représenter l'état perturbé  $\alpha$  dans

la base des états non perturbés  $\ell$  (équation 2.3.7). Pour commencer, on substitue la valeur propre de l'équation 5.1.6 dans le système d'équations 2.3.12

$$\begin{aligned} \left[ \omega_3 - \left( \frac{\omega_3 + \omega_2}{2} + \frac{(\omega_3 - \omega_2)}{2} \sqrt{1 + 4\epsilon_m^2 \beta^2} \right) \right] C_{3,3} + \Omega_{2,3} C_{2,3} &= 0 \\ \left[ \omega_2 - \left( \frac{\omega_3 + \omega_2}{2} + \frac{(\omega_3 - \omega_2)}{2} \sqrt{1 + 4\epsilon_m^2 \beta^2} \right) \right] C_{2,3} + \Omega_{2,3} C_{3,3} &= 0, \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

où  $\Omega_{2,3}$  peut être réexprimé de la manière suivante

$$\Omega_{2,3} = [\omega_3 - \omega_2] |\epsilon_m| \beta.$$

La première équation du système 5.1.7 permet d'exprimer  $C_{2,3}$  en fonction de  $C_{3,3}$

$$\begin{aligned} C_{2,3} &= \frac{\left[ \frac{\omega_3 - \omega_2}{2} (1 + 4\epsilon_m^2 \beta^2)^{1/2} - \frac{\omega_3 - \omega_2}{2} \right]}{(\omega_3 - \omega_2) |\epsilon_m| \beta} C_{3,3} \\ C_{2,3} &= \frac{1}{2} \left[ \frac{[1 + 4\epsilon_m^2 \beta^2]^{1/2} - 1}{|\epsilon_m| \beta} \right] C_{3,3}. \end{aligned} \quad (5.1.8)$$

Les coefficients de l'état perturbé doivent satisfaire la contrainte de normalisation suivante

$$C_{2,3}^2 + C_{3,3}^2 = 1,$$

laquelle permet de déterminer la valeur des coefficients de changements de bases  $C_{\ell,\alpha}$

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \left[ \frac{2 - 2[1 + 4\epsilon_m^2 \beta^2]^{1/2} + 4\epsilon_m^2 \beta^2}{\epsilon_m^2 \beta^2} \right] C_{3,3}^2 + C_{3,3}^2 &= 1 \\ C_{3,3} &= \pm \frac{\sqrt{2} |\epsilon_m| \beta}{[4\epsilon_m^2 \beta^2 + 1 - \sqrt{1 + 4\epsilon_m^2 \beta^2}]^{1/2}}. \end{aligned} \quad (5.1.9)$$

En suivant un raisonnement similaire, nous pouvons trouver les autres coefficients de changements de base

$$\begin{aligned} C_{2,2} &= \pm \frac{\sqrt{2} |\epsilon_m| \beta}{[4\epsilon_m^2 \beta^2 + 1 - \sqrt{1 + 4\epsilon_m^2 \beta^2}]^{1/2}} \\ C_{2,3} &= \pm \sqrt{\frac{2\epsilon_m^2 \beta^2 + 1 - \sqrt{1 + 4\epsilon_m^2 \beta^2}}{4\epsilon_m^2 \beta^2 + 1 - \sqrt{1 + 4\epsilon_m^2 \beta^2}}} \\ C_{3,2} &= \pm \sqrt{\frac{2\epsilon_m^2 \beta^2 + 1 - \sqrt{1 + 4\epsilon_m^2 \beta^2}}{4\epsilon_m^2 \beta^2 + 1 - \sqrt{1 + 4\epsilon_m^2 \beta^2}}}. \end{aligned} \quad (5.1.10)$$

Toutefois, ces coefficients doivent former deux vecteurs propres orthonormaux dont les éléments  $C_{3,3}$  et  $C_{2,2}$  tendent vers 1 pour un champ nul. Ainsi, il est possible de réécrire l'équation 5.1.9 et 5.1.10 pour que les signes respectent ces contraintes

$$\begin{aligned} C_{2,2} = C_{3,3} &= \frac{\sqrt{2}|\epsilon_m|\beta}{[4\epsilon_m^2\beta^2 + 1 - \sqrt{1 + 4\epsilon_m^2\beta^2}]^{1/2}} \\ C_{3,2} = -C_{2,3} &= -\sqrt{1 - (C_{2,2})^2}. \end{aligned} \quad (5.1.11)$$

Ce développement analytique a permis de caractériser l'interaction entre deux états perturbés par un champ électrique. Toutefois, nous souhaitons étudier un plus grand nombre d'états simultanément. Il est alors préférable d'obtenir les valeurs et vecteurs propres numériquement lorsque le nombre d'états perturbés considérés est plus grand que 2. De manière plus générale, l'orientation du champ électrique n'est pas nécessairement dans la direction  $z$ , surtout dans la situation dynamique. Nous généraliserons donc la procédure à la section suivante en plus de la valider dans le régime quasi-statique.

### 5.1.2. Champ électrique dans une direction aléatoire

Pour valider l'indépendance du profil en fonction de l'orientation du champ, nous produirons des profils pour un champ dans la direction  $x$ ,  $y$  et une orientation arbitraire. Le fait de traiter différentes orientations modifie le coefficient des éléments de matrices à calculer ainsi que les nombres quantiques  $m$  et  $m'$  à considérer (équation 2.4.3). L'équation 5.1.1 doit alors être modifiée selon la direction du champ choisie.

Pour l'orientation en  $x$

$$\Omega_{\ell'\ell}^{m'm} \equiv \begin{cases} \frac{e E_x}{\sqrt{2}\hbar} \langle n \ell m s | \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1,(m-m')} | n \ell' m' s \rangle & \text{si } |\ell - \ell'| = 1 \text{ et } m - m' = -1 \\ -\frac{e E_x}{\sqrt{2}\hbar} \langle n \ell m s | \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1,(m-m')} | n \ell' m' s \rangle & \text{si } |\ell - \ell'| = 1 \text{ et } m - m' = 1 \\ \omega_{n\ell s} & \text{si } |\ell - \ell'| = 0 \\ 0 & \text{si } |\ell - \ell'| > 1 \text{ ou } |m - m'| \neq 1 \end{cases} \quad (5.1.12)$$

Pour l'orientation en  $y$

$$\Omega_{\ell' \ell}^{m' m} \equiv \begin{cases} \frac{i e E_y}{\sqrt{2\hbar}} \langle n \ell m s | \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1,(m-m')} | n \ell' m' s \rangle & \text{si } |\ell - \ell'| = 1 \text{ et } |m - m'| = 1 \\ \omega_{n\ell s} & \text{si } |\ell - \ell'| = 0 \\ 0 & \text{si } |\ell - \ell'| > 1 \text{ ou } |m - m'| \neq 1 \end{cases} \quad (5.1.13)$$

Ainsi, pour un champ d'orientation arbitraire, les termes non diagonaux de la matrice produite sont une somme des équations 5.1.1, 5.1.12 et 5.1.13. Les valeurs des éléments de matrice sont entièrement décrites par les composantes cartésiennes du vecteur du champ électrique à la position de l'émetteur. Cette matrice aura alors la forme suivante:

$$\begin{pmatrix} \omega_3^{-3} & 0 & \Omega_{3,2}^{-3,-2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_3^{-2} & \Omega_{3,2}^{-2,-2} & 0 & \Omega_{3,2}^{-2,-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Omega_{2,3}^{-2,-3} & \Omega_{2,3}^{-2,-2} & \omega_2^{-2} & \Omega_{2,3}^{-2,-1} & 0 & \Omega_{2,1}^{-2,-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Omega_{3,2}^{-1,-2} & \omega_3^{-1} & \Omega_{3,2}^{-1,-1} & 0 & 0 & \Omega_{3,2}^{-1,0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Omega_{2,3}^{-1,-2} & 0 & \Omega_{2,3}^{-1,-1} & \omega_2^{-1} & \Omega_{2,1}^{-1,-1} & \Omega_{2,3}^{-1,0} & 0 & \Omega_{2,1}^{-1,0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Omega_{1,2}^{-1,-2} & 0 & \Omega_{1,2}^{-1,-1} & \omega_1^{-1} & 0 & \Omega_{1,2}^{-1,0} & 0 & \Omega_{1,0}^{-1,0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{3,2}^{0,-1} & 0 & \omega_3^0 & \Omega_{3,2}^{0,0} & 0 & 0 & 0 & \Omega_{3,2}^{0,1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Omega_{2,3}^{0,-1} & 0 & \Omega_{2,1}^{0,-1} & \Omega_{2,3}^{0,0} & \omega_2^0 & \Omega_{2,1}^{0,0} & 0 & \Omega_{2,3}^{0,1} & 0 & \Omega_{2,1}^{0,1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{1,2}^{0,-1} & 0 & 0 & \Omega_{1,2}^{0,0} & \omega_1^0 & \Omega_{1,0}^{0,0} & 0 & \Omega_{1,2}^{0,1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{0,1}^{0,-1} & 0 & 0 & \Omega_{0,1}^{0,0} & \omega_0^0 & 0 & 0 & \Omega_{0,1}^{0,1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{3,2}^{1,0} & 0 & 0 & \omega_3^1 & \Omega_{3,2}^{1,1} & 0 & 0 & \Omega_{3,2}^{1,2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{2,3}^{1,0} & 0 & \Omega_{2,1}^{1,0} & 0 & \Omega_{2,3}^{1,1} & \omega_2^1 & \Omega_{2,1}^{1,1} & \Omega_{2,3}^{1,2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{1,2}^{1,0} & 0 & \Omega_{1,0}^{1,0} & 0 & \Omega_{1,2}^{1,1} & \omega_1^1 & 0 & \Omega_{1,2}^{1,2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{3,2}^{2,1} & 0 & \omega_3^2 & \Omega_{3,2}^{2,2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{2,3}^{2,1} & 0 & \Omega_{2,1}^{2,1} & \Omega_{2,3}^{2,2} & \omega_2^2 & \Omega_{2,3}^{2,3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_{3,2}^{3,2} & \omega_3^3 \end{pmatrix}$$

La diagonalisation de cette matrice donne les valeurs et vecteurs propres du système peu importe l'orientation du champ pour les transitions dont le nombre quantique principal  $n$  du niveau supérieur est de 4. Avec cette forme, les valeurs propres et vecteurs propres ne peuvent être extraits que de la matrice complète puisqu'elle n'est plus bloc-diagonale. La méthode de diagonalisation numérique ne trouve pas toujours les valeurs et vecteurs propres dans le même ordre pour différents champs électriques. Au niveau de la production des profils de raies, cela n'a aucun impact puisque la valeur propre est toujours associée à son vecteur propre. Toutefois, si l'on souhaite visualiser le mélange des états ou la variation des

diverses composantes du profil en fonction de l'intensité du champ électrique ou du temps, il est nécessaire de trier les diverses valeurs propres correctement. La méthode de triage que nous avons élaborée est présentée à l'annexe B.

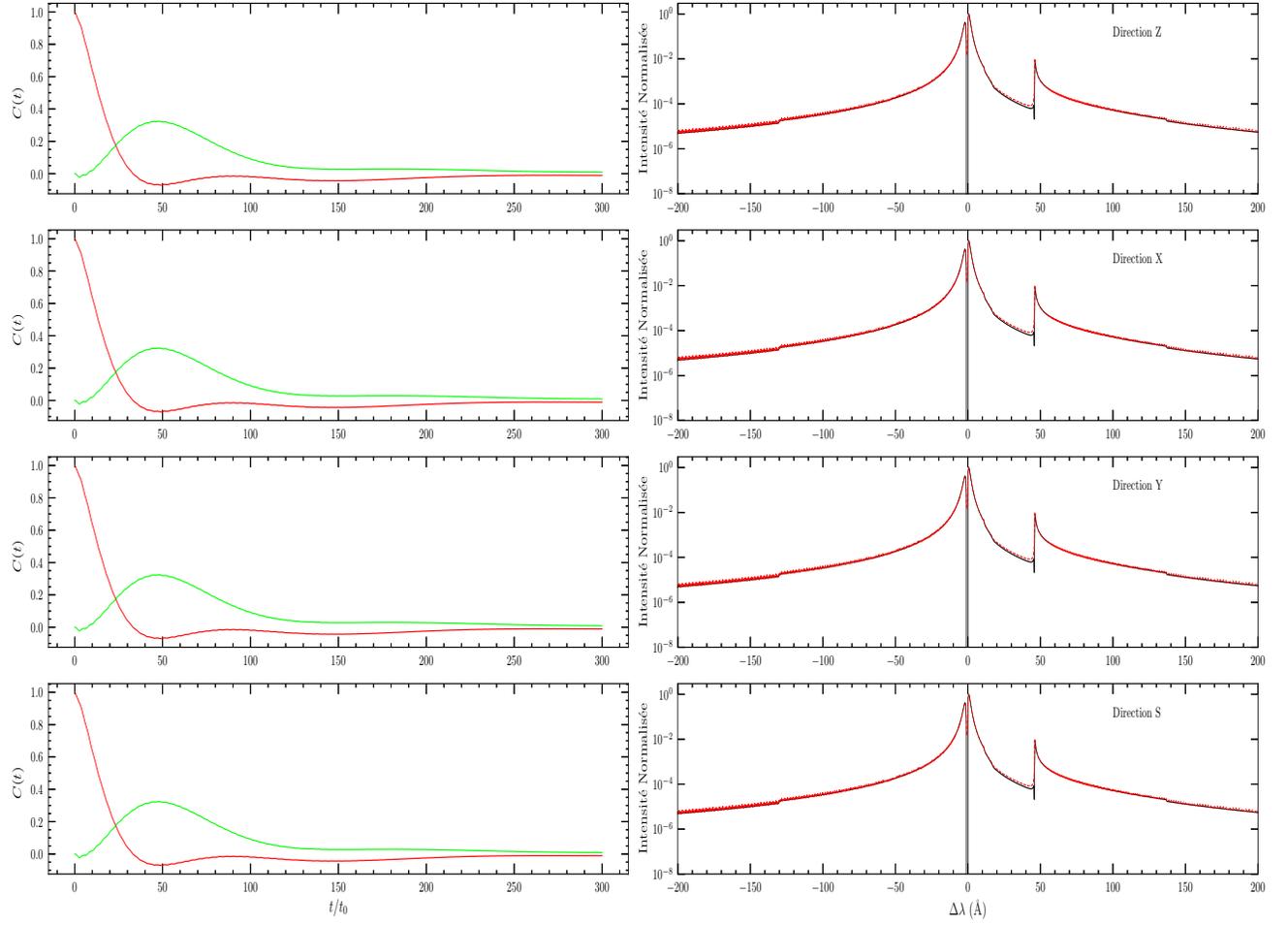
Ayant la forme générale de la matrice, nous pouvons valider notre algorithme grâce au cas quasi-statique en comparant le profil de la simulation avec celui décrit par l'équation 3.5.3.

## 5.2. Validation du profil quasi-statique

À l'aide des vecteurs et valeurs propres obtenus de la diagonalisation de la matrice dérivée à la section précédente, la fonction d'autocorrélation peut être construite pour différents vecteurs de champ électrique.

Pour caractériser le modèle quasi-statique, il faut que les perturbateurs soient fixes dans l'espace autour de l'émetteur. Puisqu'un volume de simulation ne produit qu'un champ électrique unique, nous devons considérer un grand nombre de volumes de simulation, chacun avec une configuration spatiale statique propre, pour représenter le comportement moyen de l'environnement. Pour s'assurer de la bonne construction des diverses configurations spatiales, il faut que la distribution de champs électriques générés par un grand nombre de volumes de simulation respecte celle de Hooper (1968, voir section 4.1.2). Pour chaque volume de simulation, il est alors possible de construire une fonction d'autocorrélation après avoir trouvé les valeurs propres de ce volume.

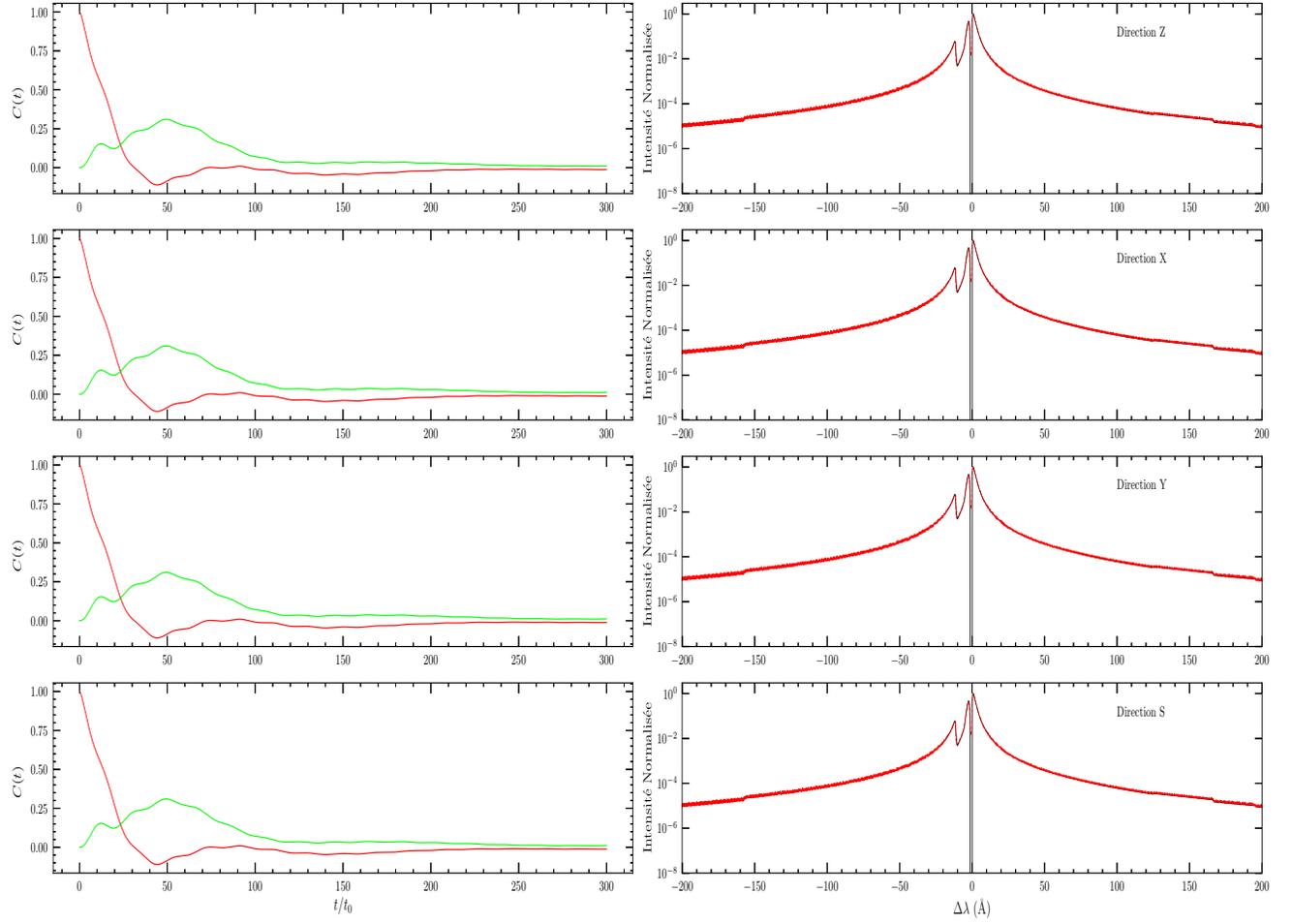
Par la suite, la moyenne des fonctions d'autocorrélation calculées dans les diverses configurations spatiales est effectuée pour décrire l'ensemble de l'environnement. Une fois la fonction moyenne construite, on effectue une transformée de Fourier pour passer de l'espace du temps à l'espace des fréquences afin d'obtenir un profil de raie dans le régime quasi-statique. Tel que discuté à l'annexe A, la méthode de la FFT n'est pas appropriée en raison de la forme oscillatoire de la fonction à intégrer; nous utilisons une implémentation de la méthode d'intégration de Filon basée sur une interpolation du type spline cubique des valeurs de  $C(t)$ . Pour confirmer la validité de notre procédure, des champs ayant une orientation dans la direction de l'axe des  $z$ , de l'axe des  $x$ , de l'axe des  $y$  ainsi qu'une orientation aléatoire mais fixe ont été produits. Les profils obtenus, montrés à la figure 5.1, pour les diverses orientations du champ sont identiques ainsi que la partie réelle et imaginaire de leur fonction



**Fig. 5.1.** Partie réelle (rouge) et imaginaire (vert) des fonctions d'autocorrélation (gauche) et profils de raie théorique (rouge) et simulé (noir) dans le régime quasi-statique pour He I  $\lambda 4471$  selon diverses orientations ( $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$  et aléatoire  $\hat{s}$ ) du champ électrique. L'invariance du profil selon l'orientation fixe du champ électrique quasi-statique valide l'algorithme de calcul de valeurs et vecteurs propres.

d'autocorrélation. Le calcul du profil en régime quasi-statique est alors confirmé, puisqu'il est indépendant de l'orientation du champ électrique. Ceci valide aussi notre algorithme de transformée de Fourier ainsi que notre algorithme de valeurs propres.

Toutefois, cela ne prouve pas que notre algorithme de génération de profils de raie est suffisamment général pour pouvoir traiter différentes transitions. Pour remédier à cela, nous utiliserons la raie He I  $\lambda 4922$ , qui possède la même configuration des niveaux d'énergie supérieurs que He I  $\lambda 4471$  mais avec un nombre quantique  $s$  différent. Cette transition peut



**Fig. 5.2.** Partie réelle (rouge) et imaginaire (vert) des fonctions d'autocorrélation (gauche) et profils de raie théorique (rouge) et simulé (noir) dans le régime quasi-statique pour He I  $\lambda 4922$  selon diverses orientations ( $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$  et aléatoire  $\hat{s}$ ) du champ électrique.

aussi être traitée par notre simulation en s'assurant d'identifier les bons niveaux d'énergie ainsi que la bonne valeur du spin. Cela permet d'obtenir la figure 5.2 dans laquelle nous retrouvons l'invariance attendue mais pour une autre transition. Notre algorithme est alors général pour toutes transitions de l'atome d'hélium si l'information — comme les valeurs d'énergies associées aux niveaux quantiques — sur ces transitions est disponible et si les approximations discutées dans les chapitres précédents sont valides (chemin classique, etc.). Il est maintenant possible de tester notre simulation dans un contexte dynamique.

# Chapitre 6

---

## Ajustement des profils dynamiques

La simulation décrite dans les chapitres précédents n'a été validée que dans le cas où le champ électrique était constant dans le temps. Maintenant que la procédure générale de la simulation a été testée au chapitre 5, il est possible d'inclure un champ variable dans notre simulation en utilisant les notions du chapitre 3. Puisque la situation dynamique ne peut être résolue analytiquement, il n'y aura pas d'exemple de la démarche de résolution comme nous l'avons fait au chapitre 5. Une plus grande attention sera portée sur les résultats de la simulation plutôt qu'à la démarche (des références aux sections d'intérêt seront toutefois faites).

Une discussion des résultats bruts sera d'abord présentée. Suivra ensuite une comparaison de nos résultats finaux avec ceux disponibles dans la littérature, ainsi qu'une validation de notre environnement de simulation. Dans ce chapitre, seules les raies He I  $\lambda\lambda 4471$  et  $4922$  seront analysées pour une température de  $20,000$  K et une densité électronique de  $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  afin de nous concentrer sur la validation des profils plutôt qu'à leur analyse détaillée (chapitre 7).

### 6.1. Résultats bruts des profils dynamiques

En introduisant la dynamique des particules, il est nécessaire de respecter la statistique du système lors de la simulation, d'où la méthode de réinjection présentée au chapitre 4. L'effet de cette dynamique peut être observé en comparant le comportement du champ électrique entre les régimes dynamique et quasi-statique.

Dans le cas quasi-statique présenté au chapitre 5, chaque volume de simulation ne génère qu'une seule valeur de champ électrique à la position de l'émetteur. Ainsi, le calcul de

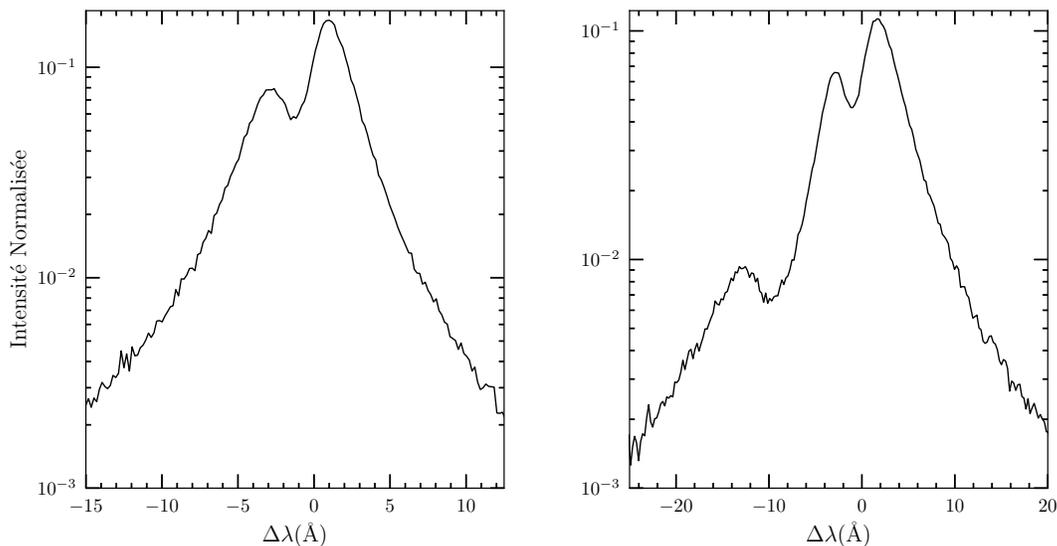
la fonction d'autocorrélation (équation 3.3.11) est trivial pour un volume en particulier. Pour le cas dynamique, la position des perturbateurs change à chaque pas de temps. Cela rend la résolution de la fonction d'autocorrélation plus complexe (équation 3.4.4) puisqu'il est nécessaire de faire le calcul dans une base d'états commune pour tous les temps de la simulation, soit la base non perturbée (voir l'équation 3.4.7).

Pour ces deux situations — quasi-statique et dynamique —, la distribution des champs électriques (voir figure 4.1) doit être reproduite en considérant l'ensemble des volumes de simulation à chaque pas de temps pour une température et densité données. Cela permet de s'assurer que le résultat obtenu soit représentatif de l'environnement. Toutefois, même si la distribution doit être respectée dans les deux cas, cela ne veut pas dire que les profils de raie générés seront identiques. Pour le cas dynamique, dans un volume de simulation donné, une corrélation dans les valeurs du champ, dû à la variation du champ, se produit d'un pas de temps à l'autre. Cette corrélation est moyennée sur l'ensemble des volumes de simulation et produit un profil distinct de celui quasi-statique. La solution de chaque volume de simulation, qui était une sommation de fonctions delta de Dirac dans le cas quasi-statique, a une forme beaucoup plus complexe qui dépend de la corrélation induite par les champs des temps précédents.

Le cas dynamique nécessite la même démarche de recherche des énergies présentée au chapitre 5. La seule différence est que cette démarche doit être répétée à chaque pas de temps. Cela fait en sorte que la simulation ne peut plus se réaliser sur un seul ordinateur s'il faut obtenir un résultat dans un temps raisonnable. Une explication générale de la structure de l'algorithme dit «multi-machines» est présentée à l'annexe C. Avec cet algorithme, les profils de raie dans le cas dynamique peuvent être réalisés pour l'ensemble des raies.

La figure 6.1 présente deux profils bruts produits par la simulation, sans post-traitement. De nombreuses oscillations sont présentes dans ces profils et cela est dû au fait qu'il existe deux sources d'erreurs numériques dont il faut tenir compte :

- (1) La transformée de Fourier. En se référant au développement de l'annexe A, selon le pas de temps choisi et la durée de la simulation, des oscillations peuvent être visibles dans le profil.
- (2) Le bruit statistique. Puisque le nombre d'espaces est limité, la distribution de champs électriques n'est pas lisse et comporte des déviations par rapport à sa valeur attendue



**Fig. 6.1.** Profils bruts des raies He I  $\lambda\lambda 4471$  (gauche) et  $4922$  (droite). Des oscillations dans les profils sont visibles loin des coeurs.

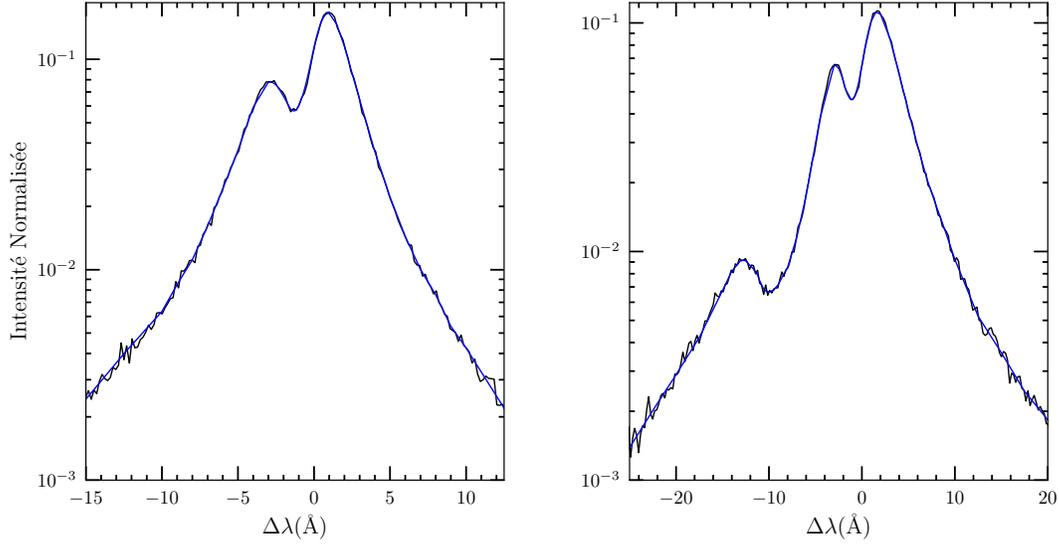
(voir figures 4.3 à 4.10). Un nombre plus grand d’espaces (plus grand que 25,000) peut réduire les oscillations dues à cette erreur numérique.

En sachant que les oscillations des profils proviennent principalement d’erreurs numériques, il est possible d’extraire uniquement l’information physique de ces profils. Pour ce faire, un lissage du profil doit être effectué. Il est important de ne pas perdre l’information physique des profils en effectuant une telle démarche numérique. C’est pourquoi un algorithme de lissage basé sur celui de Savitzky & Golay (1964) est utilisé. Son fonctionnement général est décrit à l’annexe D. De meilleurs profils peuvent alors être produits en utilisant cet algorithme.

La figure 6.2 présente nos modèles traités avec cet algorithme. Il est toutefois nécessaire de les comparer avec les résultats de la littérature afin de s’assurer de leur validité.

## 6.2. Validation des profils dynamiques

Afin de valider les profils obtenus à la section précédente, nous utiliserons les profils de Beauchamp et al. (1997), qui ont été calculés avec une théorie semi-analytique, ainsi que ceux de Gigoso & González (2009) pour la raie He I  $\lambda 4471$  et ceux de Lara et al. (2012) pour la raie de He I  $\lambda 4922$ , qui ont été produits par une simulation numérique similaire à

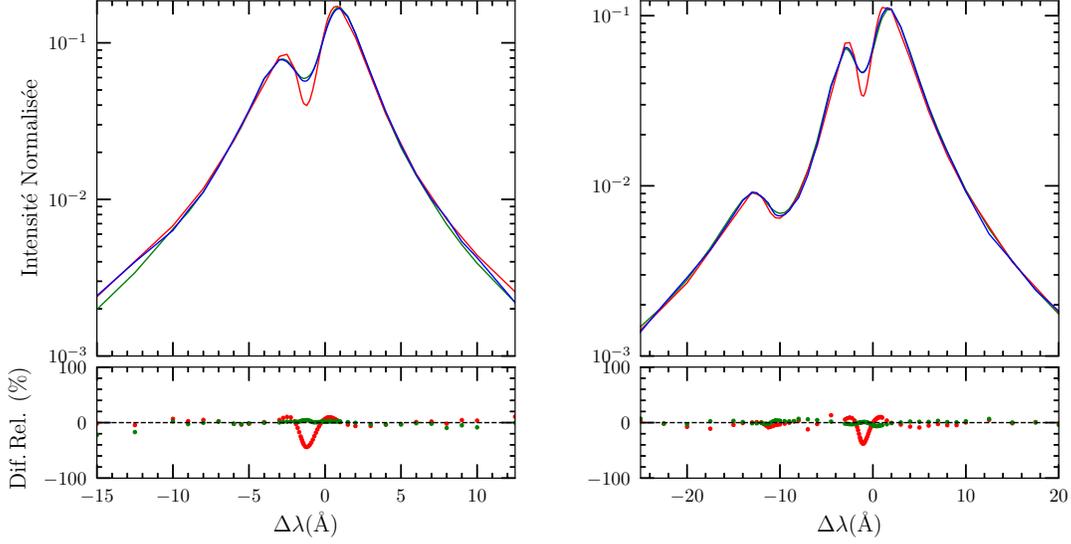


**Fig. 6.2.** Profils lissés (bleu) des raies He I  $\lambda\lambda 4471$  (gauche) et 4922 (droite) comparés aux profils de la figure 6.1. Seules les oscillations sont retirés par l’algorithme de lissage.

celle décrite au chapitre 4. Pour que nos profils soient jugés valides, il est nécessaire qu’ils présentent les aspects suivants:

- (1) Nos profils doivent montrer une forme globalement similaire aux profils de la littérature. En d’autres termes, il ne doit pas y avoir des composantes interdites inédites de larges amplitudes, et le décalage et la largeur des composantes permises et interdites doivent être similaires.
- (2) Nos profils doivent montrer des différences, principalement dans le coeur des raies, avec les profils de Beauchamp et al. (1997). Cette différence est due au traitement de la dynamique des ions, qui est absent du traitement semi-analytique de Beauchamp et al.
- (3) Nos profils doivent uniquement montrer des différences mineures ou négligeables avec les profils de Gigosos & González (2009) et Lara et al. (2012) dues à la légère différence de notre volume de simulation (voir le chapitre 4).

À l’aide de ces critères, une comparaison éclairée avec la littérature est maintenant possible. À la figure 6.3, nos profils respectent chacun des trois critères posés plus haut, prouvant ainsi leur validité, mais certaines observations peuvent être effectuées par rapport aux profils observés.



**Fig. 6.3.** Nos profils (bleu) des raies He I  $\lambda\lambda 4471$  (gauche) et 4922 (droite) comparés aux profils de Beauchamp et al. (1997) (rouge) et de Gigosos & González (2009) et Lara et al. (2012) (vert) pour les raies respectives. La différence (en pourcentage) entre les profils de la littérature et ceux de notre simulation est présentée sous les profils où les points sont de la couleur des profils comparés.

Pour les conditions de densités et de températures choisies, les différences entre nos profils et ceux de Gigosos & González (2009) et Lara et al. (2012) sont faibles, démontrant ainsi que, pour ces conditions, nos méthodes sont équivalentes. Les différences avec ceux de Beauchamp et al. (1997) ne sont notables que dans le coeur des profils, là où la dynamique des ions contribue à l’élargissement, tel qu’attendu.

L’environnement de simulation conçu dans le cadre de notre étude est donc en mesure de traiter correctement les effets dynamiques de l’environnement de l’émetteur. Il est maintenant possible d’effectuer une exploration plus détaillée des résultats extraits de nos simulations, en couvrant une plus grande plage de densités électroniques et de températures. Une analyse plus approfondie des profils deviendra alors possible, incluant une comparaison de nos résultats avec ceux d’études indépendantes pour d’autres transitions de l’hélium neutre dans le domaine du visible. Cette exploration détaillée est le sujet du dernier chapitre.



# Chapitre 7

---

## New Calculations of Stark Broadened Profiles for Neutral Helium Lines Using Computer Simulations

Ce chapitre est une adaptation de l'article *New Calculations of Stark Broadened Profiles for Neutral Helium Lines Using Computer Simulations*, par Patrick Tremblay, Alain Beauchamp et Pierre Bergeron, qui sera éventuellement soumis à *The Astrophysical Journal* quand nous aurons complété l'analyse d'un plus grand nombre de profils de raies d'hélium. Tous les calculs présentés dans cet article sont les résultats de mes travaux, mais une partie importante de l'article a été rédigée par Alain Beauchamp et Pierre Bergeron à partir du contenu des chapitres en français de mon mémoire.

### 7.1. Abstract

We present new calculations of Stark broadened profiles for neutral helium lines using computer simulations that include some important aspects aimed at better representing the dynamical environment of the helium atom. These include the unification of ion and electron treatment, the correction for ion dynamics, the transition of the electron contribution to broadening from the core to the wings of the profile, the numerical integration of the time evolution operator of helium perturbed by a fluctuating electric field, the Debye correction for the correlation of the motion of charged perturbers, local density variations, and particle reinjection. We compare the results of our simulations for the He I  $\lambda\lambda 4471$  and  $4922$  lines with other results published in the literature. We also test our simulation environment for narrow lines (He I  $\lambda\lambda 5877$  and  $6678$ ) and broader lines (He I  $\lambda\lambda 4026$  and  $4144$ ). We find that the narrow lines are more difficult to produce adequately than the the broader ones.

## 7.2. Introduction

For nearly three decades, the atmospheric parameters of white dwarf stars have been measured using the so-called spectroscopic technique, where absorption line profiles are fitted with the predictions of detailed model atmospheres (see, e.g, Bergeron et al. 1992; Eisenstein et al. 2006a; Kepler et al. 2007; Tremblay et al. 2011a; Koester & Kepler 2015; Genest-Beaulieu & Bergeron 2019b). In this case the effective temperature ( $T_{\text{eff}}$ ), surface gravity ( $\log g$ ), and the chemical abundances can be measured, while the other stellar parameters such as the stellar mass and radius, cooling age, etc., can be derived from evolutionary models. Thanks to the Sloan Digital Sky Survey (SDSS), atmospheric and physical parameters have now been determined for tens of thousand white dwarfs (see, e.g., Kepler et al., 2019). While the spectroscopic technique is arguably the most accurate approach to measure white dwarf parameters because of the physical information contained in the line profiles, it is also strongly dependent on the validity of the line profile calculations (see Tremblay & Bergeron 2009 for the case of Stark broadening of hydrogen lines). Also, the spectroscopic technique can only be applied to white dwarfs that are hot enough to show strong absorption lines, which corresponds roughly to  $T_{\text{eff}} > 6500$  K for DA stars, and  $T_{\text{eff}} > 13,000$  K for DB stars. Thus white dwarfs close to the peak of the white dwarf luminosity function cannot be studied using this method.

An alternative approach that can be applied to any type of white dwarf with relative accuracy is the photometric technique (Bergeron et al., 1997), where the overall spectral energy distribution built from observed magnitudes (converted into average fluxes) are fitted with synthetic photometry obtained from model spectra. In this case, the effective temperature and the solid angle —  $\pi(R/D)^2$  where  $R$  is the stellar radius and  $D$  the distance from Earth — are considered free parameters, which implies that in order to measure the radius (and other stellar parameters such as the mass), the distance to each object must be known from trigonometric parallax measurements. The photometric technique has been applied by Bergeron et al. (2001) to nearly all white dwarfs with trigonometric parallaxes available at that time, which unfortunately, included only a few hundred objects. Also, the optical *BVRI* and infrared *JHK* photometry they used was painstakingly secured object by object. Now thanks to the recent astrometric *Gaia* mission (Gaia Collaboration et al., 2018b), precise astrometric and photometric data for  $\sim 260,000$  high-confidence white dwarf

candidates have now become available. Furthermore, large (almost) all-sky surveys are now providing exquisite photometric data, for instance *ugriz* photometry from SDSS, or *grizy* photometry from Pan-STARRS (Panoramic Survey Telescope And Rapid Response System; Tonry et al. 2012).

Recently, Genest-Beaulieu & Bergeron (2019b, see also Genest-Beaulieu & Bergeron 2019a for a more thorough analysis of DB stars) presented a detailed spectroscopic and photometric analysis of DA and DB white dwarfs drawn from the SDSS with trigonometric parallax measurements available from the *Gaia* mission. While in principle both sets of parameters obtained from spectroscopy and photometry should agree, large discrepancies have been identified in terms of effective temperature and mass determinations (or equivalently,  $\log g$ ). Although uncertainties in the treatment of line broadening theory, convective energy transport, and perhaps chemical composition have been invoked to account for these discrepancies, it is also possible that calibration problems with the photometric and/or spectroscopic data play an important role (Bergeron et al., 2019). In order to understand better the nature of these discrepancies, every specific ingredient of both the spectroscopic and photometric techniques needs to be scrutinized in detail, both theoretically and observationally. In this paper, we focus our attention on the Stark broadening of neutral helium lines used in model atmosphere calculations of DB/DO white dwarfs.

The main line broadening mechanism in hot ( $T_{\text{eff}} \gtrsim 15,000$  K) DB white dwarfs is Stark broadening, which is caused by the presence of charged perturbers in the surrounding plasma. Historically, the neutral helium lines were treated within the semi-classical approximation introduced by Griem (1974), which consists of considering classical perturbers around a helium atom described by quantum mechanics. A few more detailed line profile calculations also became available where the quasi-static approximation was used for the ions, together with the impact approximation for the electrons; in these calculations, the influence of neighboring energy levels to the observed transition was also considered, giving rise to the so-called forbidden components. These calculations include He I  $\lambda 4471$  (Gieske & Griem, 1969; Barnard et al., 1969, 1974), He I  $\lambda 4922$  (Barnard et al., 1969, 1975), He I  $\lambda 5016$  (Barnard & Cooper, 1970), He I  $\lambda 4388$  (Shamey, 1969), He I  $\lambda 4026$  (Shamey, 1969; Gieske & Griem, 1969), and He I  $\lambda 6678$  (Ya'akobi et al., 1972). Unfortunately, the other helium lines in the optical were still calculated using the isolated line approximation, thus neglecting the

contributions of the forbidden components to the line profile (used by Griem 1974 and Dimitrijevic & Sahal-Brechot 1984). The limited access to detailed neutral helium line profiles in the optical proved to be a major obstacle to perform reliable spectroscopic analyses of DB white dwarfs.

To remedy this situation, Beauchamp et al. (1997, see also Beauchamp 1995) produced detailed line profile calculations for most neutral helium lines in the optical using the same semi-classical approximation as described above, but by also including the one-electron approximation from Baranger (1962), which provides a better transition between the impact approximation and the quasi-static contribution of the electrons, while the ions were still considered within the quasi-static approximation. These detailed line profiles significantly improved the spectroscopic analyses of DB white dwarfs (Beauchamp et al. 1996, Voss et al. 2007, Bergeron et al. 2011, Koester & Kepler 2015, Genest-Beaulieu & Bergeron 2019a), and they remain the ultimate reference in the field as of today. However, the downside of the semi-analytical approach used by Beauchamp et al. is the theoretical limitations describing the analytical contribution to the line profile from both the ions and the electrons. Even if there are several approximations for the electrons — namely the impact and one-electron approximations — for different regimes of interest, the smooth transition between these two is not guaranteed. Also, the quasi-static approximation becomes problematic in the line cores where ion dynamics contribute, in particular at lower electron densities (Barnard et al., 1974, 1975; Gigosos & Cardeñoso, 1996; Omar et al., 2006; Ben Chaouacha et al., 2007; Gigosos, 2014).

An alternative approach to the semi-analytical calculations performed by Beauchamp et al. (1997) is to produce full-fledged computer simulations. This approach has first been introduced by Stamm & Voslamber (1979) to study the effect of ion dynamics on the Ly $\beta$  hydrogen line. The method consists in generating a time sequence of electric fields to represent their statistical distributions in a natural way using a simple plasma model formed by charged particles (perturbers) and emitters (neutral or charged). Although the method appeared like an “ideal experiment”, computational time was the largest obstacle, as well as the crude treatment of the limited simulated volume. It is not until Gigosos et al. (1985) that the computing time was reduced using an improved differential equation solving algorithm for

the evolution of the emitter for hydrogen. This allowed the calculations of spectra of hydrogen Balmer lines, and Stark broadening could now be considered in more detail using a new particle re-injection technique (Gigosos & Cardenoso, 1987; Gigosos & Cardenoso, 1996), in combination with a more adequate spherical simulation volume, instead of a cubic volume. It was also demonstrated that one could remove the limitations of a finite simulation volume (Hegerfeldt & Kesting, 1988). Improvements to these techniques in the following years (Calisti et al., 1988; Frerichs, 1989; Poquérusse et al., 1996; Halenka & Olchawa, 1996; Alexiou et al., 1999a,b; Sorge & Günter, 2000; Olchawa, 2002; Wujec et al., 2002; Halenka et al., 2002; Wujec et al., 2003; Olchawa et al., 2004; Gigosos et al., 2018) allowed the calculations of both hydrogen (Gigosos & Cardenoso, 1996; Gigosos et al., 2003; Gomez, 2017) and neutral helium (Gigosos & González, 2009; Lara et al., 2012) Stark broadened line profiles. The simulation method is now gaining more and more attention (Gigosos, 2014), even though the computational time remains the largest obstacle as we gradually converge towards a more physically representative simulation (Gigosos et al., 2018).

We report in this paper the results of our own computer simulations, performed by combining the method developed by Gigosos & Cardenoso (1996) for treating naturally the dynamics of the environment around the emitting neutral helium atom, and the approach of Hegerfeldt & Kesting (1988) for dealing with local density variations. The theoretical background and the standard Stark broadening theory are first described in Sections 7.3 and 7.4, respectively. We then discuss in Section 7.5 the details of our computer simulations, including the generation and reinjection of particles in the simulation volume, and the time evolution operator. We finally present in Section 7.6 our results for the He I  $\lambda\lambda$ 4026, 4144, 4471, 4922, 5877, and 6678 lines, and compare our line profiles with those published by Beauchamp et al. (1997), Gigosos & González (2009), and Lara et al. (2012). Our conclusion follows in Section 7.7.

## 7.3. Theoretical Background

### 7.3.1. Fundamental Aspects of the Stark Broadening Theory

Most Stark-broadened line profile calculations for He I lines are based on the semi-classical theory of Stark broadening of Baranger (1958c, see also Baranger 1962; Sahal-Brechot 1969a; Smith et al. 1969; Griem 1974; Gigosos 2014). The charged particles, electrons and ions,

which perturb the emitting helium atom move along classical paths that are independent of the state of the atom, while the spectral distribution of the light emitted by the atom is computed quantum-mechanically. Since the model is developed within the coordinate system of the emitter, the effects induced by the motion of the emitters relative to the observer are not taken into account, and the computed Stark profile must thus subsequently be convoluted with a Gaussian Doppler profile.

The development of the Stark broadening theory starts with an isolated quantum system in thermodynamic equilibrium, composed of a single emitter at rest interacting with charged perturbers with no internal structure. The type and number density of the perturbers are consistent with the given macroscopic properties of the gas (temperature, electron number density, and chemical composition). The Hamiltonian of the system can be written as

$$H = H_0 + H_p + V \quad (7.3.1)$$

where  $H_0$  is the Hamiltonian of the isolated emitter,  $H_p$  is the Hamiltonian of the perturbers, including their mutual interactions, and  $V$  is the interaction between the neutral emitter and the perturbers. Since the system is in thermodynamic equilibrium, the Hamiltonian has no explicit time dependence, which implies that its eigenstates have well-defined energies.

The power spectrum  $P(\omega)$  of the plasma is defined as the power emitted per unit frequency interval. The expression for the spontaneous emission rate of an isolated atom can be generalized for the whole quantum system as a weighted sum over all possible spontaneous transitions  $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$  between initial and final eigenstates of the Hamiltonian (Equation 7.3.1),

$$P(\omega) = \frac{4\pi\omega^4}{3c^3} \sum_{if} \delta(\omega - \omega_{if}) |\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2 \rho_i, \quad (7.3.2)$$

where  $\omega_{if} = (E_i - E_f)/\hbar$  is the angular frequency of the emitted photon,  $\mathbf{d}$  is the electric dipole moment operator of the whole system, and  $\rho_i$  is the statistical weight of the initial state of the transition, i.e., its Boltzmann factor given by

$$\rho_i \propto e^{-E_i/kT}, \quad (7.3.3)$$

whose sum over all initial states is normalized to unit area.

Since we only calculate the spectrum of the emitter, the contribution of the perturbers to the dipole moment is generally omitted. In the particular case where the emitter is a helium atom, all the lines in the optical region of the spectrum are the result of transitions between singly excited states, that is, with one electron staying in the ground state. The dipole moment then reduces to that of the single electron in the excited state,

$$\mathbf{d} = e\mathbf{R} , \quad (7.3.4)$$

where  $e$  is the elementary charge, and  $\mathbf{R}$  the position operator of the electron.

One generally discards the physical constants and the slowly varying  $\omega^4$  term in Equation (7.3.2), and redefines the profile as

$$I(\omega) = \sum_{if} \delta(\omega - \omega_{if}) |\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2 \rho_i . \quad (7.3.5)$$

In practice, it is usually easier to work in the time domain, and to compute directly the Fourier transform of the profile, called the autocorrelation function

$$C(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} I(\omega) = \sum_{if} e^{-i\omega_{if}t} |\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2 \rho_i , \quad (7.3.6)$$

where  $C(t)$  satisfies the condition  $C(-t) = C^*(t)$  since  $I(\omega)$  is real. The profile can then be recovered by performing the inverse Fourier transform

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} C(t) , \quad (7.3.7)$$

where the above condition on  $C(t)$  is explicitly taken into account. The theoretical development now focuses on the detailed calculations of  $C(t)$  from the dynamics of the system.

Equation (7.3.6) is tied to a particular basis, the energy eigenstates of the whole system. It is thus advantageous to express  $C(t)$  with quantum operators only, resulting in a form independent of the basis. This allows further theoretical development and numerical computations to be performed in the most suited basis for the task. Two terms must be converted into matrix elements: the statistical weight and the oscillatory term. The former is expressed as the diagonal element of the density matrix,

$$\rho_i = \langle i | \rho | i \rangle , \quad (7.3.8)$$

where the operator

$$\rho = e^{-H/kT} / \text{Tr} (e^{-H/kT}) \quad (7.3.9)$$

is diagonal in the energy eigenstates basis. The second term can be written in terms of the time evolution operator  $U(t, 0)$ , which satisfies the Schrödinger equation

$$i\hbar \frac{dU}{dt} = HU \quad (7.3.10)$$

and the boundary condition  $U(0, 0) = I$ . Since  $H$  does not depend explicitly on time in Equation (7.3.1), the integration of Equation (7.3.10) yields the trivial solution  $U(t, 0) = e^{-iHt/\hbar}$ , which implies that

$$U|i\rangle = e^{-iE_it/\hbar}|i\rangle, \quad U^\dagger|f\rangle = e^{iE_ft/\hbar}|f\rangle. \quad (7.3.11)$$

$C(t)$  can now be written as a trace over a product of quantum operators, a form that is independent of the representation of the states of the system

$$\begin{aligned} C(t) &= \sum_{if} e^{iE_ft/\hbar} \langle i|\mathbf{d}|f\rangle e^{-iE_it/\hbar} \langle f|\mathbf{d}^\dagger|i\rangle \rho_i \\ &= \sum_{if} \langle i|\mathbf{d}U^\dagger|f\rangle \langle f|\mathbf{d}^\dagger U|i\rangle \rho_i \\ &= \text{Tr}(\mathbf{d}(U^\dagger \mathbf{d}^\dagger U)\rho). \end{aligned} \quad (7.3.12)$$

### 7.3.2. Classical Path Approximation

The classical path method divides the system into two subsystems, the emitter and the perturbers, and treats them separately, making two approximations that disentangle the two sets of coordinates in Equation (7.3.12).

The weak coupling approximation assumes that the interaction potential  $V$  between the two subsystems is negligible relative to the kinetic energy of a perturber (Smith et al., 1969). The state of the perturbers remains independent of the state of the emitter despite the interaction that produces line broadening ("no backreaction"). This has two consequences. First, the density matrix of the system becomes separable

$$\rho \propto e^{-(H_0+H_p+V)/kT} \approx e^{-H_0/kT} e^{-H_p/kT} \equiv \rho_a \rho_p, \quad (7.3.13)$$

where  $\rho_a$  and  $\rho_p$  only depend on the coordinates of the atom and the perturbers, respectively. Next, the wave function of the system can be approximated by the product of the perturbers and emitter wave functions, the latter being subject to a time-dependent interaction  $V(t)$ , with a Hamiltonian written as

$$H_a = H_0 + V(t) . \quad (7.3.14)$$

The autocorrelation function can now be written as two embedded traces over the perturbers and atomic coordinates

$$C(t) = \text{Tr}_p \{ \text{Tr}_a (\mathbf{d} U_a^\dagger \mathbf{d}^\dagger U_a) \rho_a \} , \quad (7.3.15)$$

where  $U_a$  is the time evolution operator of the emitter, which satisfies the equation

$$i\hbar \frac{dU_a}{dt} = H_a U_a . \quad (7.3.16)$$

The perturbers are still treated as quantum particles in Equation (7.3.15). The last step of the semi-classical approach is to approximate the wave function of the perturbers by a product of wave packets that are assumed to remain sufficiently localized during the characteristic timescale of the broadening process. This allows the replacement of  $V(t)$  by the corresponding classical potential function  $V(\mathbf{R}, \mathbf{x}(t))$ , where  $\mathbf{R}$  is the position operator of the radiating electron and  $\mathbf{x}$  is the set of classical 3D-coordinates of all perturbers.

The perturbers now follow classical trajectories with well-defined positions and velocities, and the trace over the states of the perturbers in Equation (7.3.15) is reinterpreted as an average over all possible configurations of classical perturbers, called the thermal average

$$C(t) = \{ \text{Tr}_a (\mathbf{d} U_a^\dagger \mathbf{d}^\dagger U_a \rho_a) \}_{\text{av}} , \quad (7.3.17)$$

where the weight of a configuration of perturbers of energy  $E_p$  is a Boltzmann factor proportional to  $e^{-E_p/kT}$ . In most He I line profile calculations, the interaction between perturbers is neglected, and the statistical weight is computed from their kinetic energies only, resulting in a product of Maxwell velocity distributions. By separating the behavior of the classical perturbers from the state of the atom, a series of dynamic configurations of perturbers can then be defined, at least conceptually, prior to quantum mechanical calculations.

### 7.3.3. Calculation of the Autocorrelation Function

Equation (7.3.17) is still not applicable for practical calculations since it includes the contribution of all possible electronic transitions of the atom, and involves products of matrices of infinite dimension. The trace being independent of the choice of basis, we adopt the states of the isolated helium atom as the basis, and express the autocorrelation function as a product of 5 matrices:

$$C(t) = \left\{ \sum_{abb'a'a''} \langle a|\mathbf{d}|b\rangle \langle b|U^\dagger(t)|b'\rangle \langle b'|\mathbf{d}^\dagger|a'\rangle \langle a''|U(t,0)|a''\rangle \langle a''|\rho|a\rangle \right\}_{\text{av}}, \quad (7.3.18)$$

where every summation is formally performed over all unperturbed states of the atom, and  $U$  (with the  $a$  subscript omitted for clarity) now stands for the time evolution operator of the atom only. The dummy indices in the summation are limited to finite sets by the following arguments.

Every He I line in the optical and in the near UV range is the result of transitions between upper levels  $|n\ell ms\rangle$  with  $n \geq 3$  and lower levels  $|2\ell' m' s\rangle$  of the same spin  $s$ . For the calculation of a single line profile, the sets of  $|a\rangle$  and  $|b\rangle$  states are defined, respectively, as the upper and lower states of the transition under study. The states within each group share the same  $n$ ,  $\ell$ , and  $s$  quantum numbers, and differ only in their  $m$  values.

In this work, we neglect the perturbation of the lower levels, which are in general much less polarizable than the upper levels. This implies that  $\langle b|U^\dagger|b'\rangle = e^{iE_b t/\hbar} \delta_{bb'}$ , and the  $b'$  index can be removed from the summation in Equation (7.3.18). The density matrix  $\rho$  is further assumed to be diagonal in the unperturbed He I states basis, an approximation always used in practice in the calculations of He I profiles, to our knowledge. Moreover,  $\langle a|\rho|a\rangle$  has the same value for all  $|a\rangle$  states, which allows us to discard this multiplicative factor because the final profile will be normalized to unity. Combining these results, we find that

$$C(t) = \left\{ \sum_{aba'} e^{iE_b t/\hbar} \langle a|\mathbf{d}|b\rangle \langle b|\mathbf{d}^\dagger|a'\rangle \langle a'|U(t,0)|a\rangle \right\}_{\text{av}}. \quad (7.3.19)$$

As discussed in Appendix 7.8, the upper states  $|a\rangle$ , when subjected to the potential  $V(t)$ , mix with their neighbouring states of the same spin, mainly those of the same quantum number  $n$ . In this work, the  $|a'\rangle$  states will be defined as the subspace of states with the same value

of  $n$  for the upper states of the transition, a special case of the no-quenching approximation (Kolb & Griem, 1958), which assumes that collisions do not cause transitions between states with different values of  $n$ . Thus, the  $|a\rangle$  states are a subset of the  $|a'\rangle$  set of states, which is disjoint from the lower  $|b\rangle$  states. For example, considering the  $2P^1 - 4D^1$   $\lambda 4922$  transition, the three sets of states are the seven states  $|4, \ell = 2, m, s = 0\rangle$  with  $|m| \leq 2$ , the 16 states  $|4\ell m, s = 0\rangle$  with  $\ell \leq 3$  and  $|m| \leq \ell$ , and the single state  $|2, \ell = 1, m, s = 0\rangle$  with  $|m| \leq 1$ .

Our last approximation is the definition of the potential  $V(t)$  in the definition of the time evolution operator of the atom in Equation (7.3.16). We only keep the first non-vanishing term in the multipole expansion of the interaction between the atom and the perturbers, which is the dipole term, which yields the Hamiltonian

$$H_a = H_0 + e\mathbf{F}(t) \cdot \mathbf{R} , \quad (7.3.20)$$

where  $\mathbf{F}$  is the electric field at the position of the emitter.

At this stage, the standard theory and the computer simulation approach take different routes for the integration of the Schrödinger equation of the time evolution operator of the atom (Equation 7.3.16), and for the calculations of the thermal average  $\{\dots\}_{\text{av}}$  over all configurations of classical perturbers.

## 7.4. Standard Stark Broadening Theory

This section presents a brief outline of the standard Stark broadening theory, and focuses on the core approximations of this theory, most of which are corrected by the simulation method.

### 7.4.1. Basic Principles

The standard Stark broadening theory uses the quasi-static approximation for the ions and the impact approximation for the electrons. This section presents a summary of this theory for the simpler case where the lower levels of the transition are not significantly perturbed (see Baranger 1958c, 1962, Smith et al. 1969, Griem 1974, Barnard et al. 1969, and Sahal-Brechot 1969a,b, for a more general description of the theory).

Since the ions are assumed to be quasi-static, effects stemming from their motion are neglected, and the electric field associated with the presence of ions may be chosen to point

arbitrarily toward the  $z$  direction. For each fixed configuration of ion perturbers, the Hamiltonian of the emitter immersed in the field  $F$  produced by the ions then becomes

$$H(t) = H_a + eFZ + V_e(t) \quad (7.4.1)$$

where  $V_e$  is the time-varying potential due to the electrons, and  $Z$  is the  $z$ -component of  $\mathbf{R}$ .

The interaction between ions and electrons is neglected, thus allowing the separation of the thermal average into averages over configurations of ions and electrons. Moreover, since the Hamiltonian (Equation 7.4.1) does not depend on the detailed configuration of the ions, except through the ion electric field, the average over the static ion configurations can be replaced by an average over ion electric fields, weighted by the microfield statistical distribution. The autocorrelation function of the profile then becomes

$$C(t) = \int_0^\infty dF W_R(F) \{C_e(t; F)\}_{\text{av}_e} \quad (7.4.2)$$

where  $C_e(t; F)$  is the autocorrelation function due to the moving electrons in the static field  $F$ . In this expression, the distribution of the microfield  $W_R(F)$  takes into account the correlation in the spatial distribution of the ions due to their mutual interactions, and is parameterized by  $R$ , the ratio of the mean distance between ions and the Debye radius (Hooper, 1968).

The autocorrelation function  $C_e(t; F)$  for the electron is a generalization of Equation (7.3.19), now applied to the Hamiltonian in Equation (7.4.1)

$$C_e(t; F) = \sum_{\alpha b \alpha'} e^{iE_b t/\hbar} \langle \alpha | \mathbf{d} | b \rangle \langle b | \mathbf{d}^\dagger | \alpha' \rangle \{ \langle \alpha' | U_e(t; F) | \alpha \rangle \}_{\text{av}_e} , \quad (7.4.3)$$

where the summation is performed over all perturbed upper states  $|\alpha(F)\rangle$  of the helium atom subjected to the constant field  $F$ . Similarly, the time evolution operator satisfies the Schrödinger equation

$$i\hbar \frac{dU_e(t; F)}{dt} = (H_a + eFZ + V_e(t)) U_e(t; F) . \quad (7.4.4)$$

Finally, the “electronic” thermal average  $\{\dots\}_{\text{av}_e}$  is performed over all possible trajectories of the electrons.

### 7.4.2. The Impact Approximation

There is no closed-form solution for the electronic evolution operator  $U_e(t; F)$  that satisfies the Schrödinger equation (Equation 7.4.4), but it can be written as a series expansion using perturbation theory,

$$U_e(t; F) = e^{-iH_a(F)t} \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 V'(t_1) + \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 V'(t_1) V'(t_2) + \dots \right] \quad (7.4.5)$$

where the operator  $V'(t) \equiv e^{-iH_a(F)t} V_e(t; F) e^{iH_a(F)t}$ . The increasing complexity of the successive terms in the expansion makes the handling of overlapping collisions intractable, as well as the calculation of the contribution of a single collision.

The impact approximation avoids these problems by assuming that (1) strong collisions do not overlap in time, (2) the contribution of weak overlapping collisions can be approximated by the truncated expansion (Equation 7.4.5) up to second order, and (3) the collision time is much shorter than the inverse half width at half maximum of the line (the completed collision assumption). Performing the thermal average of the resulting  $U_e$  in Equation (7.4.3), and computing the inverse Fourier transform (Equation 7.3.7), then yield the line profile

$$I(\omega) = \int_0^\infty dF W_R(F) I_e(\omega; F) , \quad (7.4.6)$$

which is a weighted sum of electron-broadened profiles at constant ionic field

$$I_e(\omega; F) = -\frac{1}{\pi} \sum_{ab\alpha'} \langle \alpha | \mathbf{d} | b \rangle \langle b | \mathbf{d}^\dagger | \alpha' \rangle \langle \alpha' | [i(\omega - \omega_{ab}) + \Phi]^{-1} | \alpha' \rangle , \quad (7.4.7)$$

where  $\hbar\omega_{ab}$  is the energy difference between the perturbed upper states  $|\alpha\rangle$  and unperturbed lower states  $|b\rangle$ , and the collision operator  $\Phi$  represents the contribution of the electrons (in the impact regime) to broadening. Here, the dependence of the perturbed upper states, the perturbed energies, and the collision operator  $\Phi$  on the field  $F$  is omitted. The diagonalization process that yields the perturbed energies, as well as the unitary transformation between perturbed and unperturbed states, are discussed in Appendix 7.8.

As a result of the impact approximation, the collision operator  $\Phi$  for a given electron number density  $N_e$  corresponds to the second order term of the expansion in Equation

(7.4.5) integrated over the full trajectory of a single electron, and averaged over all possible trajectories

$$\Phi(F) = N_e \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^2 \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 V'(t_1) V'(t_2) \right\}_{\text{av}_e} . \quad (7.4.8)$$

In this averaging process, the electron is assumed to move along a rectilinear trajectory at constant velocity, described by the expression

$$\mathbf{r}(t) = \boldsymbol{\rho} + \mathbf{v}(t - t_0) , \quad (7.4.9)$$

where  $\boldsymbol{\rho}$  and  $t_0$  are the position and time of nearest approach, respectively, and  $\mathbf{v}$  is the velocity perpendicular to  $\boldsymbol{\rho}$ . The impact parameter of the trajectory is the norm of  $\boldsymbol{\rho}$ .

The averaging process involves integrals over the impact parameter  $\rho \equiv |\boldsymbol{\rho}|$ , the orientation of the  $\boldsymbol{\rho}$  and  $\mathbf{v}$  vectors, as well as a weighted average over the Maxwell-Boltzmann velocity distribution. The integral over  $\rho$  is formally between 0 and infinity, but upper and lower cut-offs are defined for practical calculations. A maximal impact parameter  $\rho_{\text{max}}$ , of the order of the Debye radius, is used to approximate the screening effect due to the correlation in the spatial distribution of the electrons. A minimal impact parameter  $\rho_{\text{min}, \alpha\alpha'}(v; F)$  — a function of the velocity, different for each pair of states — is further required because the perturbation expansion (Equation 7.4.5) breaks down at small impact parameters, which produces a diverging integral. The collision operator  $\Phi$  is therefore computed as a sum of contributions from weak and strong collisions, characterized by impact parameters larger and smaller than  $\rho_{\text{min}}$ , respectively,

$$\Phi(F) = \Phi(F)^{\text{weak}} + \Phi(F)^{\text{strong}} . \quad (7.4.10)$$

The strong-collision term is calculated with a classical theory (Lorentz, 1906), which is probably correct within a factor 2 (Griem et al., 1962).

In the far wings, the complete collision approximation of the impact theory is no longer valid. A unified theory that properly makes the transition from the impact to the quasi-static regime for the electron has been developed for hydrogen, taking advantage of the  $\ell$ -degeneracy of the levels (Vidal et al. 1970). There is however no such theory for the helium atom, and the impact broadening theory must therefore be replaced by the one-electron theory.

### 7.4.3. The One-Electron Theory

The one-electron theory of Baranger (1962) describes the profile in the line wings, where non-overlapping strong collisions contribute, and it also explains how the profile approximately turns into a quasi-static line profile. This theory is not applicable to the entire profile, however, and it even diverges in the line core. The one-electron theory is not considered as part of the standard Stark broadening theory, but it constitutes nevertheless the alternative in the far wing where the impact approximation is no longer valid. Fortunately, the interval of validity of the one-perturber approximation partially overlaps with that of the impact theory. The one-perturber theory describes the profile in the wings where  $\Delta\omega$  is much larger than the width of the line, while the impact theory is valid when  $\Delta\omega$  is less than a typical collision time.

In the one-perturber theory, Equation (7.4.7) remains valid, but the  $\Phi$  operator, as well as the minimal impact parameter  $\rho_{\min}$  that segregates weak and strong collisions, change with respect to the impact theory, and become frequency-dependent. There is no rigorous way to make the transition from one theory to the other. However, the profiles calculated separately from each theory are almost identical in their common overlapping region; the transition may thus be chosen quite arbitrarily. Such a method is described in Beauchamp et al. (1997).

### 7.4.4. Summary of Approximations

The standard Stark broadening theory thus includes several approximations, in addition to those already implied by the classical path approximation. Ion dynamics is neglected, overlapping electronic collisions are treated approximately, and the contribution from weak and strong electronic collisions are modelled in distinct ways.

Another issue — linked to the profile normalization process — occurs when one combines the standard theory with the one-electron theory. As shown by Kolb & Griem (1958), the standard theory yields, by construction, a profile with a well-defined area equal to

$$\int I(\omega)d\omega = \sum_{ab} |\langle a|\mathbf{d}|b\rangle|^2. \quad (7.4.11)$$

It is then trivial to normalize the profile to unit area as required for synthetic spectrum calculations. When combining the impact theory for the line core with the one-electron

theory in the wings, this normalization process is no longer valid, which constitutes a formal weakness of this approach.

The purpose of the computer simulation approach is to lift these approximations, while retaining the important aspects of the semi-classical approach.

## 7.5. Computer Simulations

### 7.5.1. Overview of the Approach

The purpose of the computer simulation approach is to integrate the Schrödinger equation (Equation 7.3.16) for the time evolution operator  $U(t,0)$  of the perturbed emitter, without resorting to the truncated power series approximation of the analytical theory. This method considers correctly the effect of overlapping collisions on line broadening, regardless of their duration, thus unifying the treatment of ions and electrons. The numerical integration process treats indifferently weak and strong electronic collisions, whose types were defined only in the context of the semi-analytical theory. Moreover, the transition between the two electron broadening regimes — namely, the impact regime in the core and the one-electron regime in the wings —, as well as ion dynamics, are managed naturally by this method.

The semi-classical approximation remains in force: the perturbors move along classical paths, corresponding to straight lines when their mutual interaction is neglected, and when the emitter is neutral. The classical potential  $V(t)$  is still approximated by the first terms in the dipole expansion of the electrostatic potential. In this work, we keep the first non-vanishing term that led to the Hamiltonian given in Equation (7.3.20). We apply the  $\mu$ -ion model from Seidel & Stamm (1982), where a stationary emitter is located at the center of a fixed simulation volume. In this model, it is the motion of the perturbors in the rest frame of the emitter that is being simulated.

The thermal average of the autocorrelation function (Equation 7.3.19), which corresponds to an average over the set of all possible configurations of dynamic perturbors, is approximated by an average over a large, but finite set of configurations, whose statistical properties are representative of the infinite set. The autocorrelation function is then written as an average over  $N$  autocorrelation functions  $C_i(t)$ , each one calculated for a given configuration  $i$ ,

$$C(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_i(t) . \quad (7.5.1)$$

The line profile then follows from the numerical Fourier transform (Equation 7.3.7). The whole process guarantees that the profile can be properly normalized, thus resolving the issue raised in Section 7.4.4.

Each dynamic configuration consists of a spherical simulation volume of finite radius  $R$ , a single emitter located at the center of the sphere, and a set of charged perturbers moving along classical paths and generating a time-varying electric field  $\mathbf{F}(t)$  at the position of the emitter. The radius must ensure that the expected statistical distribution of the electric field intensity is recovered. As discussed by Hegerfeldt & Kesting (1988), this radius must be of the order of the Debye radius.

The value of  $C_i$  — the autocorrelation function of the  $i$ th scenario — is calculated for a series of discrete times  $t_k = k\Delta$ , in two separate steps. First, a time sequence of electric field  $\mathbf{F}_i(t_k)$  at the origin of the simulation volume is generated from the spatial distribution of moving perturbers at that time. Equation (7.3.16) is then integrated in order to get the time evolution operator  $U_i(t_k)$ . The validity of the simulation method thus rests on the procedure for generating the dynamic configurations, and for calculating the time evolution operator.

## 7.5.2. Properties of the Simulation Volume

### 7.5.2.1. *The Perturber-Emitter Interaction*

In these computer simulations, perturbers follow straight line trajectories, and the effect of the spatial correlation produced by their mutual interaction is thus neglected. As discussed in Section 7.4.1, this correlation has a measurable impact on the statistical distribution  $W(F)$  of the microfield. A more realistic simulation should take into account the effect on their trajectory of the Coulomb interaction between the perturbers. The resulting distribution of the microfields would then be in agreement with the Hooper distribution, but at the cost of a prohibitive computing time.

The microfield distribution resulting from computer simulations with rectilinear trajectories corresponds to the Holtsmark distribution, a special case of the  $W(F)$  distribution for independent particles. In such calculations, the perturber-emitter interaction is described by a Coulomb field. A way to recover the proper microfield distributions with rectilinear trajectories is to replace the physically valid Coulomb potential with a Debye potential (Gigosos et al., 2003). The microfield distribution is then well reproduced, including in the far

wings where the contribution from individual strong collisions become important. In what follows, we adopt a Debye potential to describe the required perturber-emitter interaction.

#### 7.5.2.2. *The Simulation Volume and the Impact Coordinate System*

The simulation volume consists of three concentric spheres, all centered on the position of the emitter. The smallest sphere corresponds to the exclusion volume, with a radius of the order of the Bohr radius. The particles never cross this volume in order to avoid both penetrating and high-energy collisions, for which case the classical path approximation breaks down. The second sphere, called the calculation volume, includes the perturbers that contribute to the electric field at the position of the emitter. In our simulations, its radius is set to three times the Debye radius computed by considering all perturbers (electrons and ions). Hegerfeldt & Kesting (1988) demonstrated that the resulting microfield distribution reproduces adequately the theoretical distribution  $W(F)$  from Hooper (1968), discussed in Section 7.5.2.1, if the perturber-emitter interaction is described by a Debye potential. The third and largest sphere, called the simulation volume, is limited by a radius equal to three times the Debye radius of the electrons (excluding ions). Among the perturbers in the simulation volume, only those present in the calculation volume contribute to the electric field, allowing the possibility of simulating the variation of the local number density in the calculation volume. This important aspect was first introduced by Hegerfeldt & Kesting (1988). The number of particles in the calculation volume then follows a Poisson distribution.

The coordinate system that gives the best control over the trajectory generation process is the impact coordinate system, described by Hegerfeldt & Kesting (1988). These coordinates are :

- (1) the impact parameter  $b$ , which is the distance of closest approach between the emitter and the perturber,
- (2) the velocity  $v$  of the perturber,
- (3) the time  $t_0$  of closest approach,
- (4) the angle  $\alpha$  that defines the trajectory of the perturber in the plane formed by the point of closest approach  $\mathbf{b}$  and the velocity vector,
- (5) the angles  $\phi$  and  $\theta$  that define the orientation of the velocity vector.

In this coordinate system, the position of the perturber is

$$\mathbf{r}(t) = b(\hat{v}_1 \cos \alpha + \hat{v}_2 \sin \alpha) + \hat{v}_3 v(t - t_0), \quad (7.5.2)$$

where the vectors  $\hat{v}_1$ ,  $\hat{v}_2$ , and  $\hat{v}_3$  form an orthonormal basis,

$$\begin{aligned} \hat{v}_1 &= (-\cos \phi \cos \theta, -\sin \phi \cos \theta, \sin \theta) \\ \hat{v}_2 &= (-\sin \phi, \cos \phi, 0) \\ \hat{v}_3 &= (\cos \phi \sin \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \theta). \end{aligned} \quad (7.5.3)$$

In Equation (7.5.2),  $\mathbf{r}$  is perpendicular to  $\hat{v}_3$  when  $t = t_0$ , as required.

The advantages of this coordinate system are two-fold. First, an appropriate choice of the coordinate  $t_0$  constrains each perturber to be inside the simulation volume at the initialization phase of the simulation ( $t = 0$ ), once the velocity  $v$  and the impact parameter  $b$  have been assigned. Second, a proper value of the impact parameter further guarantees that the impact vector is within the simulation volume, but outside the exclusion volume, in the vicinity of the emitter.

### 7.5.3. Generation and Reinjection of Particles

One of the most challenging difficulties with computer simulations is to maintain a consistent number of perturbers, in a fixed simulation volume, which satisfies the joint distribution of space and velocity, without introducing undesirable correlations. To deal with this problem, Gigos & Cardenoso (1996) proposed a simulation approach that combines an initialization phase and a particle reinjection process. Particles are first placed inside the simulation volume at  $t = 0$ . As the simulation evolves, some particles leave the volume and are replaced by new particles of the same type, which enter the volume and follow a straight line trajectory inside the sphere. The outgoing particles are excluded for the rest of the simulation.

The particle generation process is a crucial step in the simulation. It must ensure that in a given simulation volume, the statistical properties of the system are maintained at all times, and at every single time considering all simulations running in parallel. To do so, the coordinates of each perturber must be generated randomly from their joint statistical distribution. Luckily, this distribution can be written as a product of distributions of the six phase space coordinates. A uniform random number generator can then be used to generate

a random number, which is then mapped onto the desired value based on the statistical distribution of the generated coordinates. Two mapping strategies are applied below: the inverse transformation method (Press et al., 2007), and a method based on cells (Gigosos & Cardeñoso, 1996).

The statistical distribution of each coordinate is obtained with the following reasoning. The probability that a perturber is found inside an infinitesimal volume  $\mathbf{d}^3\mathbf{r} \mathbf{d}^3\mathbf{v}$  of the phase space is proportional to the product of this volume (in order to satisfy the constraint of an isotropic and homogeneous space) with a Boltzmann weight  $e^{-v^2/v_T^2}$ . Using the Jacobian  $|\partial(\mathbf{r}, \mathbf{v})/\partial(\alpha, t_0, b, \phi, \theta, v)|$ , the joint probability distribution in the impact coordinate system becomes

$$f(\alpha, t_0, b, \phi, \theta, v) \propto bv^3 e^{-v^2/v_T^2} \sin \theta . \quad (7.5.4)$$

However, since the simulation volume has a finite radius, the perturbers must also respect at  $t = 0$  the following condition

$$|\mathbf{r}|^2 = b^2 + v^2 t_0^2 \leq R^2 , \quad (7.5.5)$$

which translates into a constraint on the  $t_0$  coordinate

$$|t_0| \leq t_{0,\max} , \quad (7.5.6)$$

where  $t_{0,\max}$  is a function of both the velocity  $v$  and the impact parameter  $b$

$$t_{0,\max} \equiv \frac{\sqrt{R^2 - b^2}}{v} . \quad (7.5.7)$$

Hence, the variables  $b$ ,  $v$ , and  $t_0$  are not statistically independent even if the distribution (Equation 7.5.4) is separable. This statistical dependency is taken into account when the initial coordinates of the particles are randomly generated.

The joint distribution of the three variables, written as

$$f(t_0, b, v) \propto bv^3 e^{-v^2/v_T^2} , \quad (7.5.8)$$

can be expressed as the following product of conditional distributions

$$f(t_0, b, v) = f_t(t_0|b, v) f_b(b|v) f_v(v) , \quad (7.5.9)$$

where the  $|$  symbol stands for “given”. Therefore, the 3-variable  $f$  distribution becomes the product of the distribution of  $t_0$  (given  $b$  and  $v$ ),  $b$  (given  $v$ ), and  $v$ . Since  $t_0$  is uniform between the  $\pm t_{0,\max}$  limits (for given  $b$  and  $v$ ), we can write

$$f_t(t_0|b, v) = \frac{1}{2t_{0,\max}} = \frac{v}{2\sqrt{R^2 - b^2}}. \quad (7.5.10)$$

By substituting this result into Equation (7.5.8), we find that

$$f_b(b|v) \propto b\sqrt{R^2 - b^2}, \quad (7.5.11)$$

an expression independent of  $v$ . This, in turn, implies that  $b$  and  $v$  can be generated independently. Finally, the two previous results can be combined to yield the Maxwell-Boltzmann distribution for the velocity

$$f_v(v) \propto v^2 e^{-v^2/v_T^2}. \quad (7.5.12)$$

The initialization process respects the joint statistical distribution of the coordinates at time  $t = 0$ . The values of the coordinates  $\alpha$ ,  $\phi$ , and  $t_0$  are found by applying a linear transformation on the output of the uniform number generator over the interval (0,1), given that their statistical distribution is uniform. The generation of the variable  $\theta$  (with  $f(\theta) \propto \sin \theta$ ) is obtained with the inverse transformation method.

The generation of the  $b$  and  $v$  coordinates follows a method developed by Gigoso & Cardeñoso (1996) based on cells. The main advantage of this method is to prevent a progressive displacement of the particles towards the surface of the sphere, an apparent cooling of the plasma, as well as an undesired correlation between the two coordinates. The statistical distribution of  $b$  is first divided into  $N_p$  cells of equal probability (where  $N_p$  is the number of particles of type  $p$ ). Each particle is then assigned to a cell, and its  $b$  value is chosen randomly from within the interval associated with the cell. The method is similar for  $v$ , but the statistical distribution is divided into  $N_p + 1$  cells instead. Each particle is assigned to a  $v$ -cell, leaving one empty cell. This empty cell plays a crucial role in the reinjection process.

A particle reinjection process ensures that the joint statistical distribution of coordinates remains unchanged (within normal fluctuations) over the entire length of the simulation. When a particle leaves the volume, a new particle of the same type is randomly positioned at the surface of the simulation volume. Its coordinates are then computed as follows. The new particle is assigned to the same  $b$ -cell as the leaving particle, and the impact parameter is generated randomly from within this cell. For the velocity, the particle is assigned to the

empty cell, and the cell of the leaving particle becomes the empty cell. The value of the  $t_0$  coordinate is fixed, given  $b$  and  $v$ , by the constraint that the particle is at the surface of the outer sphere. Finally, the angular coordinates ( $\alpha$ ,  $\theta$ , and  $\phi$ ) are generated with the same method as in the initialization phase.

#### 7.5.4. The Time Evolution Operator

Once an electric field sequence has been generated over a succession of  $N$  consecutive times  $t_k \equiv k\Delta t$  (with  $k = 0$  to  $N - 1$ ), the time evolution operator  $U(t_k, 0)$  of the perturbed atom must be calculated. The numerical integration of Equation (7.3.10) is performed using the solution for a Hamiltonian  $H$  with no explicit time dependence,  $U(t_1, t_0) = e^{-iH(t_1-t_0)/\hbar}$ , as well as two properties of the time evolution operator: (1) the time continuity condition,  $U(t, t) = I$ , and (2) the composition property,  $U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0)$ . These last two properties allow us to write  $U(t_k, 0)$  as a product of operators, computed over all previous time intervals

$$U(t_k, 0) = \prod_{j=0}^{k-1} U(t_{j+1}, t_j) . \quad (7.5.13)$$

This last equation is exact for any set of increasing values of  $t_j$ , but is not applicable unless  $U(t_{j+1}, t_j)$  can effectively be calculated.

Following Gigos & Cardeñoso (1996), we make the approximation that the electric field, and hence the Hamiltonian operator  $H$ , remain constant in every time interval  $(t_j, t_{j+1})$ . These are denoted by  $\mathbf{F}_j$  and  $H_j$ , respectively. The following Schrödinger equation

$$i\hbar \frac{dU(t, t_{j-1})}{dt} = [H_0 + e\mathbf{F}_{j-1} \cdot \mathbf{R}] U(t, t_{j-1}) \quad (7.5.14)$$

is then solved, one evolution operator at a time,

$$U(t_j, t_{j-1}) = e^{-iH_{j-1}\Delta t/\hbar} , \quad (7.5.15)$$

which leads to

$$U(t_k, 0) = \prod_{j=1}^k e^{-iH_{j-1}\Delta t/\hbar} = e^{-iH_{k-1}\Delta t/\hbar} U(t_{k-1}, 0) . \quad (7.5.16)$$

This numerical integration scheme guarantees that the time evolution operator is unitary.

The matrix elements of the time evolution operator are defined in the base  $|a\rangle$  of the unperturbed states of the helium atom in Equation (7.3.19). It is however much simpler to first diagonalize  $U(t_k, t_{k+1})$  in the base of the perturbed states  $|\alpha\rangle$ , specific to this time

interval, and then to carry out the unitary transformation that transforms  $U$  into the base of the unperturbed states. As discussed in the Appendix 7.8, the diagonalization of the operator  $H$  with a constant electric field yields the energies  $E_\alpha$  of the perturbed states, and the transformation matrix with coefficients  $\langle a|\alpha\rangle$ . This process is repeated at every time step for the operator  $H_{k-1}$ . The matrix elements of  $U$  in the unperturbed basis then become

$$\begin{aligned}\langle a|U(t_k, 0)|a'\rangle &= \sum_{\alpha\alpha'a''} \langle a|\alpha\rangle \langle \alpha|e^{-iH_{k-1}\Delta t/\hbar}|\alpha'\rangle \langle \alpha'|a''\rangle \langle a''|U(t_{k-1}, 0)|a'\rangle \\ &= \sum_{\alpha a''} \langle a|\alpha\rangle e^{-iE_\alpha\Delta t/\hbar} \langle \alpha|a''\rangle \langle a''|U(t_{k-1}, 0)|a'\rangle ,\end{aligned}\tag{7.5.17}$$

where the subscript  $k - 1$  is omitted for the perturbed energies  $E_\alpha$ , and perturbed states  $|\alpha\rangle$  and  $|\alpha'\rangle$ .

This integration procedure assumes that the variation of the electric field is negligible during the time step  $\Delta t$ . The latter must thus be chosen carefully to insure that this approximation remains valid, while keeping computing time to a minimum. A characteristic time for the temporal variation of the electric field is the collision time of the fastest perturbers, i.e. the electrons. We use the time step proposed by Gigos & Cardenoso (1996), which is one hundredth of the electron collision time

$$\Delta t = 0.01 \frac{r_0}{v_T} = 0.01 \left( \frac{3}{4\pi N_e} \right)^{1/3} \left( \frac{2kT}{\mu_e} \right)^{-1/2},\tag{7.5.18}$$

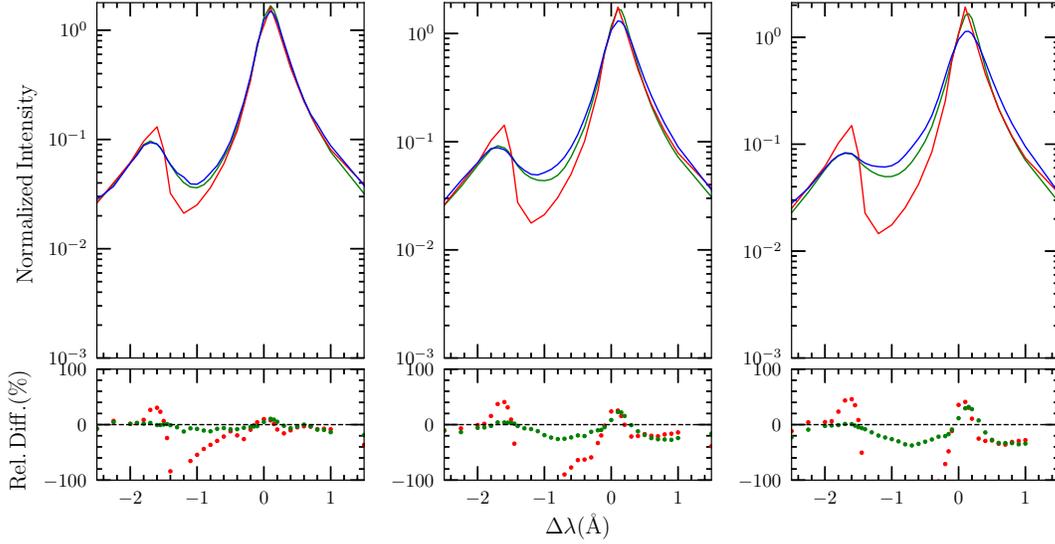
where  $r_0$  is the average distance between an electron and its nearest neighbor,  $v_T$  is the thermal velocity of the electrons,  $k$  is the Boltzmann constant,  $T$  is the plasma temperature, and  $N_e$  is the electron number density. The thermal velocity is computed with the reduced mass  $\mu_e$ , consistent with the  $\mu$ -ion model.

Most spectral lines presented in this work were computed by averaging the autocorrelation function over 25,000 simulation volumes, each one producing a time sequence of 50,000 electric field vectors  $\mathbf{F}(t_k)$ . The energy levels  $E_\alpha$  and states  $|\alpha\rangle$  of the perturbed helium atom were calculated at each time step  $t_k$ , in order to update the time evolution operator and the autocorrelation function  $C(t_k)$ . This calculation was parallelized on a cluster of computers. The typical computing time for a line at a given electronic density and temperature varied from 4095 to 32,760 CPU hours.

## 7.6. Results

We produced detailed profiles for six neutral helium lines, only two of which have previously published profiles obtained with the computer simulation approach, to our knowledge. The corresponding transitions show a wide range of behaviors, which allow us to test our own computer simulations under various physical conditions. Note that our line profiles are not convolved with a Doppler profile, to allow a direct comparison with those of Gigosos & González (2009) and Lara et al. (2012). We also compare our results with a new series of line profiles similar to those described by Beauchamp et al. (1997), based on the standard Stark broadening theory. These profiles have been calculated specifically for this work, using the same approximations as in our computer simulations. More specifically (1) the contribution of the lower levels to the broadening is neglected, (2) the perturbed upper levels are restricted to those with the same quantum number  $n$  as the upper level of the permitted transition, and (3) the dipole matrix elements are calculated with the method of Oertel & Shomo (1968). In addition, the two sets of profiles were generated for the same grid of temperatures, electron densities, and frequency, allowing for a more direct comparison. Since ions are assumed to be quasi-static in the standard Stark broadening theory, differences between both sets of calculations are expected particularly in the line cores, where ion dynamics — neglected in the standard theory — is properly managed by the computer simulation approach (Gigosos & González, 2009).

In what follows, we present our profile calculations for the following helium lines: He I  $\lambda 4471$   $2P^3 - 4D^3$ ,  $\lambda 4922$   $2P^1 - 4D^1$ ,  $\lambda 5877$   $2P^3 - 3D^3$ ,  $\lambda 6678$   $2P^1 - 3D^1$ ,  $\lambda 4026$   $2P^3 - 5D^3$ , and  $\lambda 4144$   $2P^1 - 6D^1$ . The He I  $\lambda\lambda 4471$  and  $4922$  lines are the strongest in DB white dwarf spectra, and they represent special cases for which different implementations of the Stark broadening theory have been compared over the last fifty years or so (Griem, 1968; Barnard et al., 1969; Calisti et al., 1988; Schoning, 1994; Beauchamp et al., 1997; Gigosos & González, 2009; Lara et al., 2012). Our grid covers electron number densities from  $N_e = 1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  to  $6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , and temperatures of  $T = 10,000 \text{ K}$ ,  $20,000 \text{ K}$ , and  $40,000 \text{ K}$ , which are relevant for synthetic spectrum calculations. We are interested here in lower densities in order to reproduce the physical conditions encountered in the upper atmospheric layers of white dwarfs where the line cores are formed. We also present exploratory calculations at  $N_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  and  $T = 20,000 \text{ K}$  for four additional helium lines: He I  $\lambda\lambda 5877$  and  $6678$ ,



**Fig. 7.1.** He I  $\lambda 4471$  line profiles obtained from our computer simulations (blue line) compared with those of Beauchamp et al. (1997, red line) and Gigosos & González (2009, green line). The profiles are shown for  $N_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  and for temperatures of  $T = 10,000 \text{ K}$ ,  $20,000 \text{ K}$ , and  $40,000 \text{ K}$ , from left to right. For a better comparison, the relative differences (in %) are displayed below each panel with the same colors as those used in the upper panel.

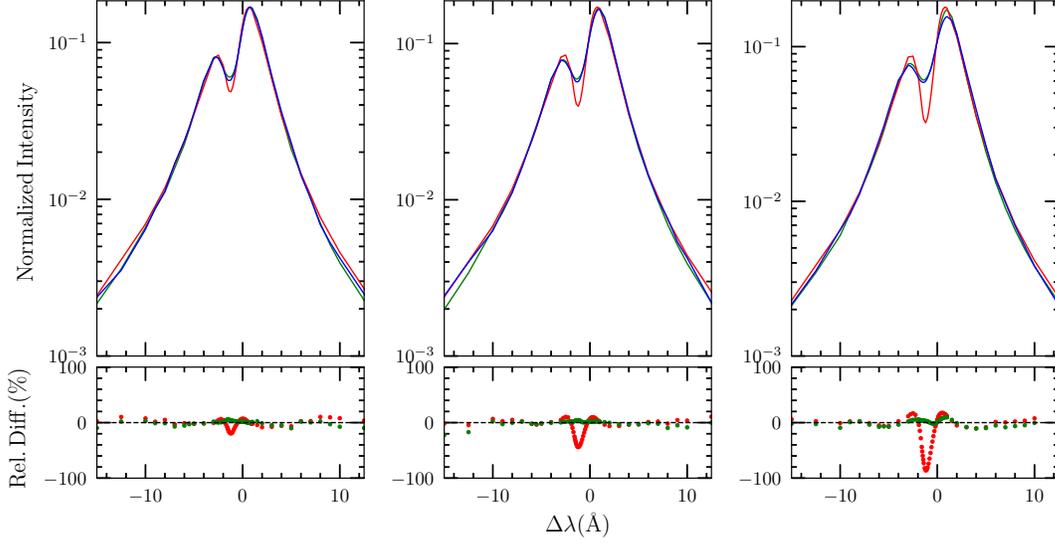
whose upper level has the principal quantum number  $n = 3$ , as well as He I  $\lambda\lambda 4026$  and  $4144$ , with  $n$  higher than 4.

### 7.6.1. Helium Transitions with Upper Level $n = 4$

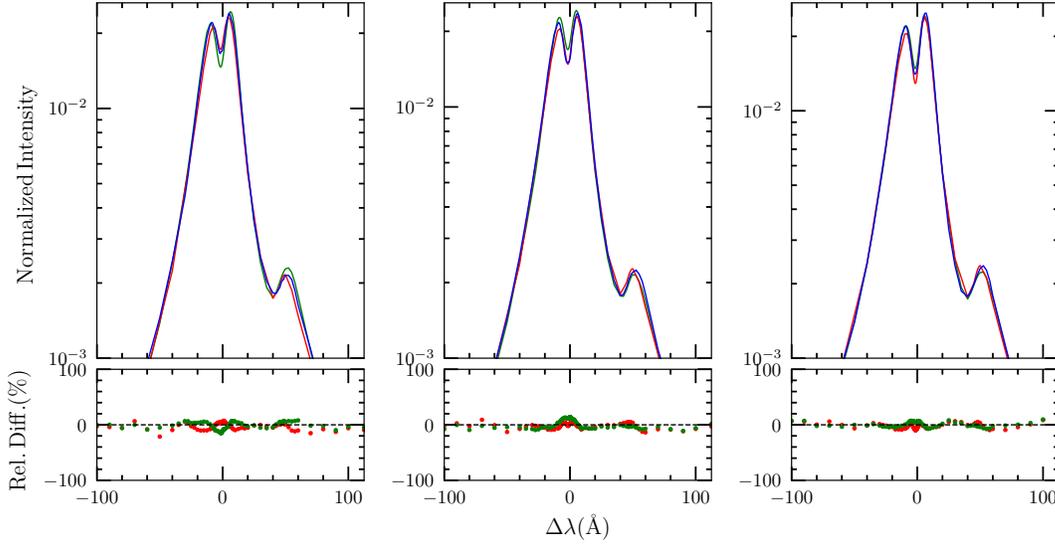
#### 7.6.1.1. He I $\lambda 4471$

Profiles for the He I  $\lambda 4471$  line are displayed in Figures 7.1 to 7.3 for various values of temperature and electron density. The profiles for  $N_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , shown in Figure 7.1, correspond to the lowest density available in the calculations of Gigosos & González (2009). Any difference between our computer simulations and theirs will require some explanation, because we followed essentially the same approach.

As expected, the main difference between our profiles, obtained from computer simulations, and those of Beauchamp et al. (1997), based on the standard Stark broadening theory, is for the low-density regime, near the line core of the permitted and forbidden components,



**Fig. 7.2.** Same as Figure 7.1 but with  $N_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .



**Fig. 7.3.** Same as Figure 7.1 but with  $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .

as well as between them. This difference, of the order of a factor of 2 for some profiles, is due to ion dynamics, whose effect is known to be important at low densities (Barnard et al., 1974; Gigoso & Cardenoso, 1996; Gigoso & González, 2009; Ferri et al., 2014). Both sets of profiles become almost identical at high densities, however, when ion dynamics becomes

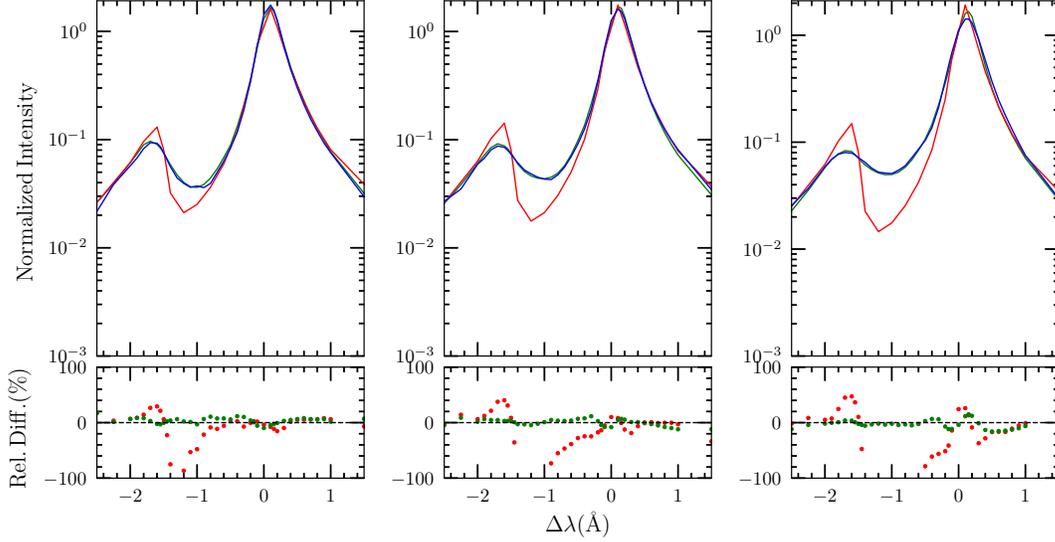
negligible. We conclude that the main difference between the two sets of profiles is in the treatment of ion dynamics, and that the other approximation made in the work of Beauchamp et al. (1997), namely the treatment of the transition between the impact and the one-electron regimes, seems appropriate at high densities, at least for this particular line.

Another reason must be invoked to account for the differences between our profiles and those of Gigoso & González (2009), given that our simulation environment is strongly inspired by their work. In this case, the main difference between our approach and theirs lies in the design of the simulation volume. As described in Section 7.5.2.2, our model consists of a calculation volume, defined as the volume that includes the perturbers contributing to the electric field at the position of the emitter, as well as a larger simulation volume. The particle reinjection process involves the simulation volume, which allows for local density variations, as properly implemented in the computer simulations of Hegerfeldt & Kesting (1988). In the work of Gigoso & González, these two spheres are identical, and the number of perturbers therefore remains constant in the calculation volume. No study has shown that one approach is better than the other. For comparison purposes, we generated a new grid of profiles with identical calculation and simulation volumes, the results of which are displayed in Figure 7.4. Our profiles and those of Gigoso & González now overlap almost perfectly. The comparison between the results shown in Figures 7.1 and 7.4 reveals that the impact of local density variations is important mostly in the region between the permitted and the forbidden components ( $\Delta\lambda \sim -1 \text{ \AA}$ ), as well as in the core of the permitted component. The minor differences that remain at higher temperature in the core of the latter component (see rightmost panel of Figure 7.4) still require an explanation.

In general, the three grids of profiles for He I  $\lambda 4471$  are in excellent agreement at high densities, where ion dynamics is less important, thus demonstrating the validity of the semi-analytical approach in this regime.

#### 7.6.1.2. He I $\lambda 4922$

The profiles for He I  $\lambda 4922$  are presented in Figures 7.5 to 7.7 for the same temperatures and electron densities as before. The differences between our profiles obtained from computer simulations and those calculated using the standard Stark broadening can be explained again in terms of the effect of ions dynamics, similar to that already discussed in the context of the

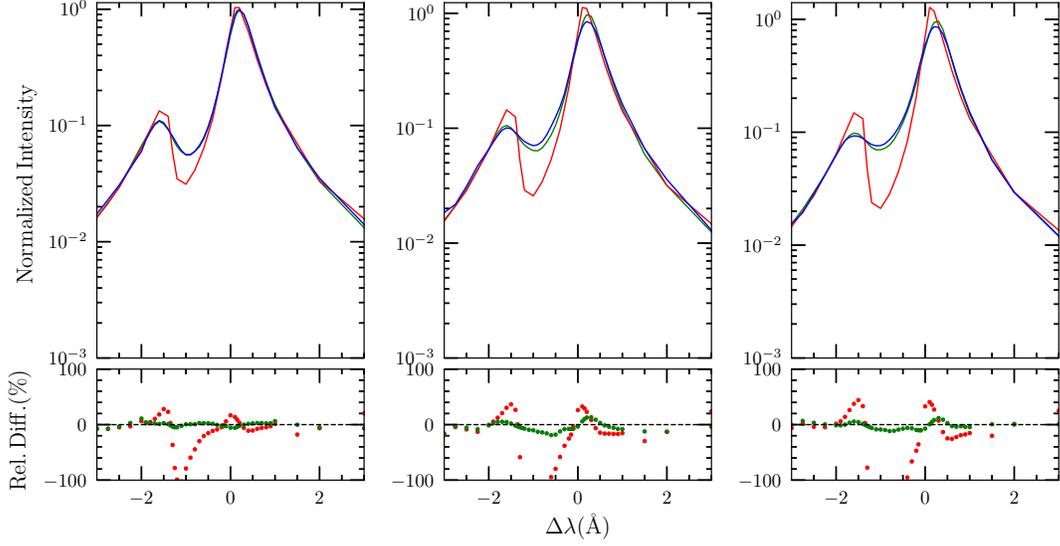


**Fig. 7.4.** Same as Figure 7.1, but without taking into account local density variations, as properly implemented in the simulations of Hegerfeldt & Kesting (1988). Our profiles (blue line) then resemble more those of Gigosos & González (2009, green line), where this effect was neglected.

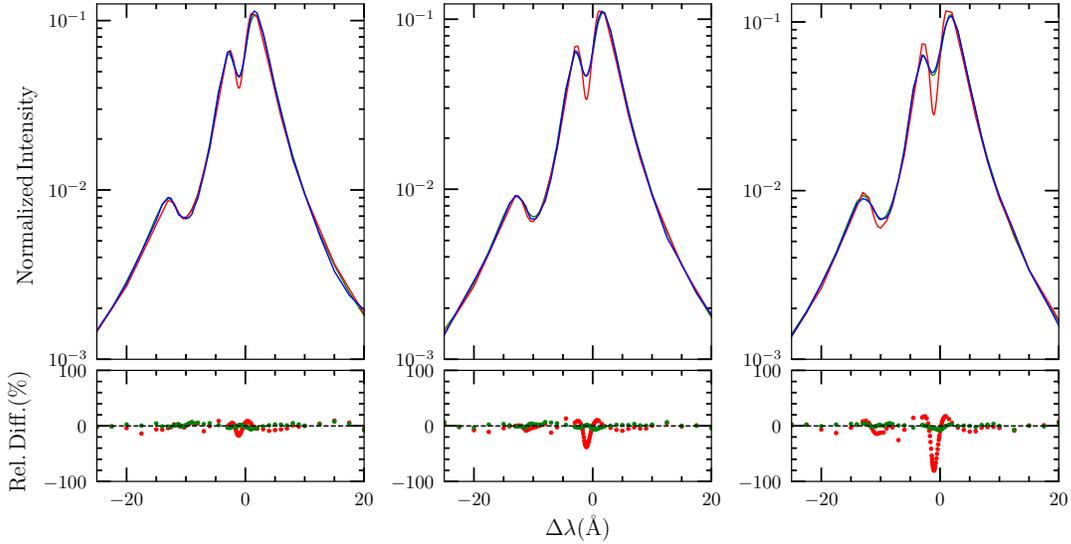
He I  $\lambda 4471$  line, in particular at low densities, near the line cores, and in the region between the permitted component and its nearest forbidden component. The effect of ion dynamics can also be observed near the forbidden component at  $\Delta\lambda \sim -10 \text{ \AA}$  in Figure 7.6.

The differences between our He I  $\lambda 4922$  profiles and the computer simulations from Lara et al. (2012, see Figure 7.5), based on the same approach as Gigosos & González (2009), are smaller than the differences observed previously for He I  $\lambda 4471$ , especially at  $T = 40,000 \text{ K}$ , although they do occur in the same range of wavelength. As before, it is possible to demonstrate that these differences are due to our treatment of local density variations, by generating a new grid of profiles where such variations are neglected. The results of this experiment, displayed in Figure 7.8, confirm this interpretation. Hence, the origin of these differences, as well as those for He I  $\lambda\lambda 4471$  and  $4922$ , is the inclusion of local density variations in our computer simulations.

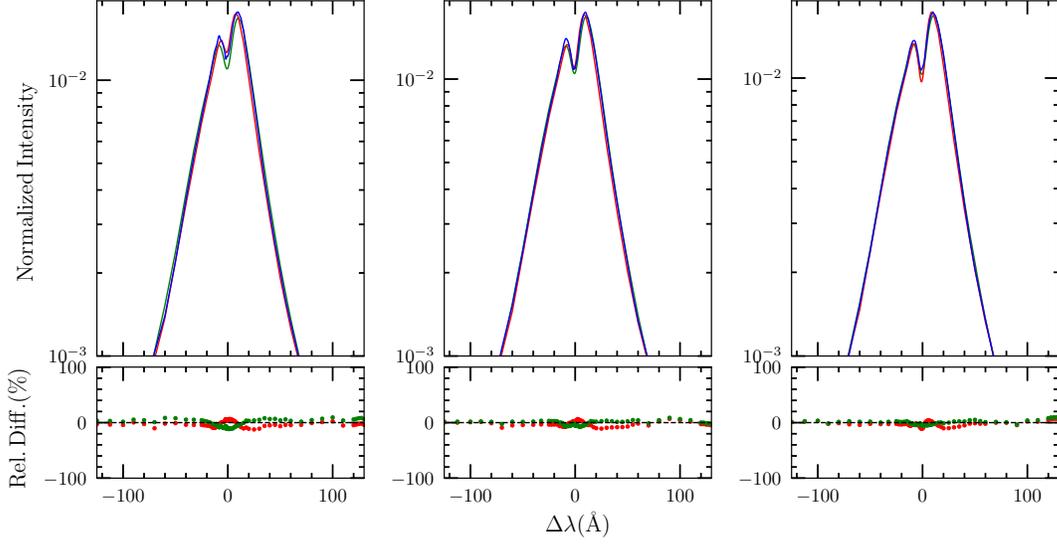
The results presented so far for He I  $\lambda\lambda 4471$  and  $4922$  confirm that our computer simulation environment reproduces the published profiles adequately, including those obtained



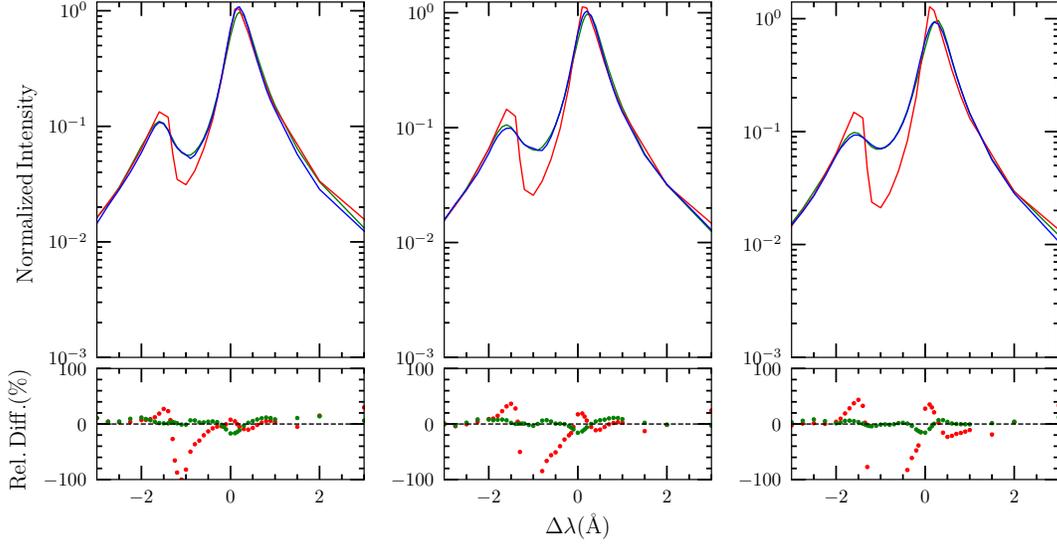
**Fig. 7.5.** He I  $\lambda 4922$  line profiles obtained from our computer simulations (blue line) compared with those of Beauchamp et al. (1997, red line) and Lara et al. (2012, green line). The profiles are shown for  $N_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  and for temperatures of  $T = 10,000 \text{ K}$ ,  $20,000 \text{ K}$ , and  $40,000 \text{ K}$ , from left to right. For a better comparison, the relative differences (in %) are displayed below each panel with the same colors as those used in the upper panel.



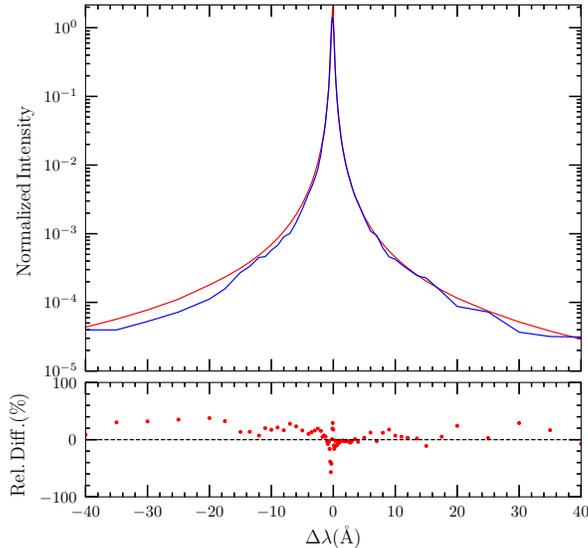
**Fig. 7.6.** Same as Figure 7.5 but with  $N_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .



**Fig. 7.7.** Same as Figure 7.5 but with  $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .



**Fig. 7.8.** Same as Figure 7.5, but without taking into account local density variations, as properly implemented in the simulations of Hegerfeldt & Kesting (1988). The differences between our profiles (blue line) and those of Lara et al. (2012, green line) are of the same order as those observed in Figure 7.4.

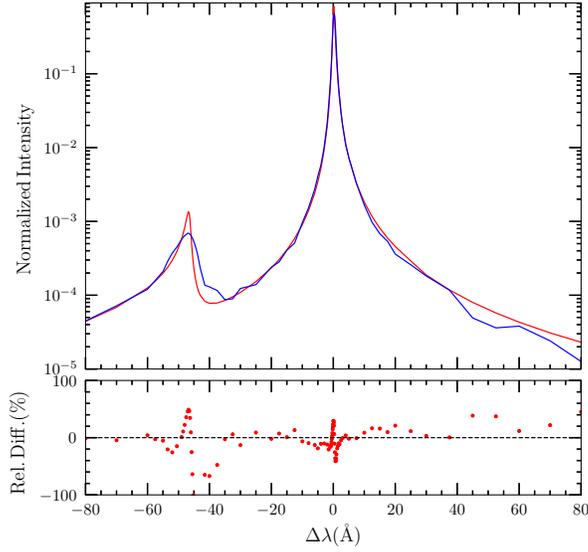


**Fig. 7.9.** He I  $\lambda 5877$  line profile obtained from our computer simulations (blue line) compared with that of Beauchamp et al. (1997, red line), for  $N_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  and  $T = 20,000 \text{ K}$ . The relative differences (in %) are displayed at the bottom with the same colors as those used in the upper panel.

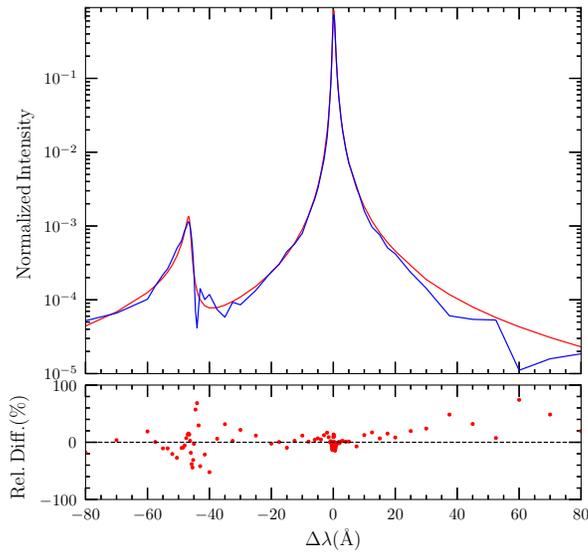
from independent simulations. Furthermore, we also validated the versatility of our implementation by easily adapting our calculations to different energy levels. We can now explore new He I transitions, characterized by upper levels with a principal quantum number different than  $n = 4$ , for which the only published detailed profiles have been obtained from the standard Stark broadening theory.

### 7.6.2. Helium Transitions with Upper Level $n = 3$

We compare in Figures 7.9 and 7.10 the profiles for the He I  $\lambda 5877$   $2P^3 - 3D^3$  and  $\lambda 6678$   $2P^1 - 3D^1$  lines, respectively, obtained from our computer simulations with those calculated using the standard Stark broadening theory (Beauchamp et al., 1997). The comparisons displayed here differ significantly from those shown above for He I  $\lambda\lambda 4471$  and  $4922$ . Neutral helium transitions involving an upper state with a principal quantum number  $n = 3$  are generally isolated lines at the electron densities considered in this work, and they are characterized by a Lorentzian shape, with a weak and distant forbidden component, resulting from the high energy differences between the upper level of the permitted transition and its



**Fig. 7.10.** He I  $\lambda 6678$  line profile obtained from our computer simulations (blue line) compared with that of Beauchamp et al. (1997, red line), for  $N_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  and  $T = 20,000 \text{ K}$ . The relative differences (in %) are displayed at the bottom with the same colors as those used in the upper panel.



**Fig. 7.11.** Same as Figure 7.10 but without taking ion dynamics into account in the computer simulation. The largest difference occurs for the forbidden component.

neighboring levels. The closest forbidden component for He I  $\lambda 5877$  is  $\lambda 6068$   $2P^3 - 3P^3$ . This forbidden component constitutes a challenge for the simulation method, because its extremely low intensity, especially in the wings, could easily be misrepresented as a result of numerical noise. The profile for He I  $\lambda 6678$  includes the very asymmetrical forbidden component  $\lambda 6632$   $2P^1 - 3P^1$ .

Despite its apparent simplicity, a Lorentzian-like line profile represents another challenge for computer simulations. Indeed, since the permitted component of these two lines is very narrow, and that the forbidden component is at much lower intensities, it is necessary to improve the wavelength (or frequency) resolution and to decrease the numerical noise. This implies increasing both the number of time steps and simulation volumes. A larger number of simulated volumes yields a better representation of the microfield distribution for the stronger, less likely, electric fields that contribute in the wings of the profile. For He I  $\lambda 5877$ , a simulation time of 70,000 time steps and 50,000 simulation volumes were required to define properly the permitted component and to reduce the numerical noise, respectively. Some residual noise remains in the wings of the profile displayed in Figure 7.9, despite these modifications. For He I  $\lambda 6678$ , 60,000 time steps and 60,000 simulation volumes were required to properly define the permitted and forbidden components.

The He I  $\lambda 6678$  line profile represents an interesting case. Although the shape of its permitted component is very similar between both sets of calculations displayed in Figure 7.10, there are important differences in the shape of the forbidden component. The most plausible explanation for the more rounded shape of the forbidden component obtained with our computer simulations is the additional broadening produced by ion dynamics. To test this hypothesis, we generated a profile with a version of our computer simulation in which the ions are at rest. The results, displayed in Figure 7.11, indicate that indeed, the forbidden component calculated with quasi-static ions now closely resemble that predicted by the standard Stark broadening theory (despite the presence of numerical noise). The effect of ion dynamics therefore remains important for this forbidden component, even at densities as high as  $N_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .

So far, we have shown that our computer simulation framework reproduces well the profiles of some isolated lines, as well as lines with forbidden components that are well-separated from the permitted component. We now consider the case of helium lines involving upper levels for which  $n > 4$ , which are almost hydrogenic.

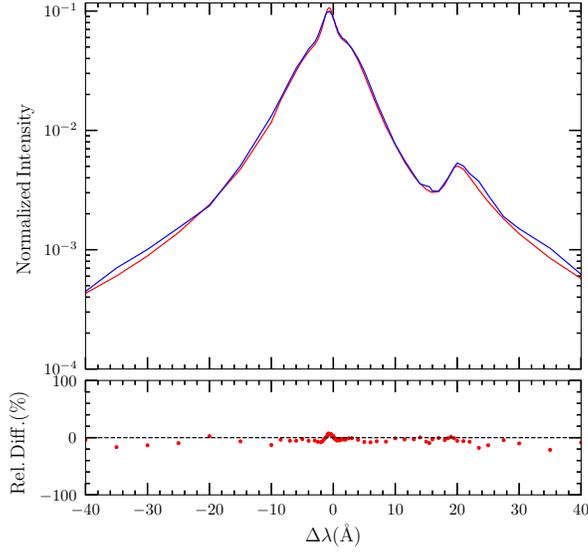
### 7.6.3. Helium Transitions with Upper Level $n > 4$

Similar comparisons for the He I  $\lambda 4026$   $2P^3 - 5D^3$  and  $\lambda 4144$   $2P^1 - 6D^1$  lines are displayed in Figures 7.12 and 7.13, respectively. For these lines, the permitted component is superimposed on the strong forbidden components  $2P - nP, F, G$  because these upper levels, of almost identical energy in the isolated helium atom, are mixed by the electric field. The width of the lines tends to increase with the principal quantum number  $n$  for a given electron density and temperature. This behavior can be appreciated by comparing the results shown in Figures 7.12 and 7.13 — which both correspond to transitions with an upper level  $n = 5$  and  $n = 6$ , respectively — with the results displayed in Figures 7.9 and 7.10 for  $n = 3$ .

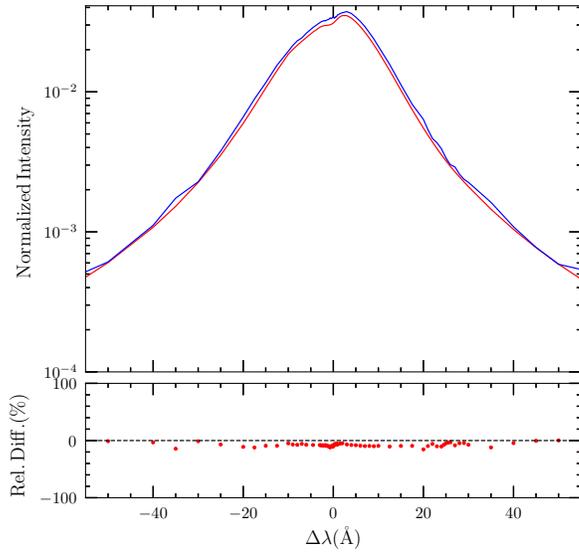
The calculation of these profiles is numerically demanding since the dimension of the matrices for which the eigenvalues and eigenvectors have to be extracted increases as  $n^2$ . However, the absence of narrow structures in the profiles implies that a lower resolution in wavelength (or frequency) is sufficient to represent the profile correctly. The profile for He I  $\lambda 4144$  ( $n = 6$ ) was computed with 40,000 time steps, instead of the 50,000 time steps required for the He I  $\lambda 4026$  ( $n = 5$ ) profile. The latter also shows the forbidden component  $\lambda 4045$   $2P^3 - 5P^3$ , as well as a complex behavior near the peak of the profile, where the permitted component mixes with other forbidden components. The profiles of these two lines calculated with our computer simulations compare well with those produced with the standard Stark broadening theory, at this electron density. Ion dynamics appears to have less impact on these line profiles than for He I  $\lambda\lambda 4471$  and  $4922$  at an electron density of  $N_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .

## 7.7. Conclusion

We presented new calculations of Stark broadened profiles for the He I  $\lambda\lambda 4471$  and  $4922$  lines using computer simulations performed by combining the method developed by Gigoso & Cardenoso (1996) for treating the dynamics of the environment around the emitting neutral



**Fig. 7.12.** Same as Figures 7.9 and 7.10 but for the He I  $\lambda 4026$  line.



**Fig. 7.13.** Same as Figures 7.9 and 7.10 but for the He I  $\lambda 4144$  line.

helium atom, and the approach of Hegerfeldt & Kesting (1988) for dealing with local density variations. These line profiles offer a better representation of the ion dynamics than the semi-analytical calculations of Beauchamp et al. (1997), and they also represent a different view of the computer simulations discussed by Gigosos & González (2009) and Lara et al. (2012),

who did not consider the effect of local density variations. By also neglecting this effect in our calculations, we were able to properly test the validity of our computer simulation environment, by reproducing almost perfectly the He I  $\lambda\lambda 4471$  and  $4922$  profiles published by Gigosos & González (2009) and Lara et al. (2012), respectively.

An exploration of narrower helium lines, such as He I  $\lambda\lambda 5877$  and  $6678$ , showed that the shape of the permitted components is Lorentzian-like, while their forbidden components behave much differently. In particular, we were able to demonstrate — by removing the effect of ions dynamics from our computer simulations and by comparing the results with those of Beauchamp et al. (1997) — that the forbidden component of He I  $\lambda 6678$  is significantly affected by this effect. Also, an exploration of broader lines, such as He I  $\lambda\lambda 4026$  and  $4144$ , showed how the CPU time required in our simulations increases dramatically for transitions to higher principal numbers  $n$ , as a result of the larger amount of neighboring energy levels to be included in the calculations. Fortunately, since there are no narrow features in these profiles, some of the computing time can be reduced by decreasing the simulation time.

Although we were able to produce profiles for a total of six neutral helium lines so far, the computer simulation approach begins to show its limitation regarding the amount of effort required to optimize the quality of the line profile calculations, given the amount of memory space and CPU time required to perform the simulation. Thus, additional numerical challenges remain to be dealt with before we are able to produce full grids of He I line profiles. Nevertheless, the results obtained so far from our computer simulations represent a most encouraging and promising avenue of investigation.

Finally, our computer simulations should eventually provide a new environment for exploring other physical problems encountered in the modeling of white dwarf atmospheres, such as the Stark broadening of hydrogen lines in DA stars, as well as van der Waals broadening in DB stars. In future work, we also expect to lift some of the approximations discussed in this paper (see Section 7.3), namely the neglect of the mixing of lower levels, the mixing of upper levels with levels of different  $n$ , and the quadrupolar term in the multipole expansion of the potential.

## Acknowledgments

This work is supported in part by the NSERC Canada and by the Fund FRQ-NT (Québec).

## 7.8. Appendix: The Perturbed He I State Basis

Integration of the time evolution operator (Equation 7.5.15) and computation of the electron-broadened profile (Equation 7.4.7) for a field  $F$  — whether within the impact or the one-electron approximation — use the perturbed basis  $|\alpha(F)\rangle$ , and not the set of energy states  $|a\rangle$  of the isolated helium atom. Since the dipole matrix elements are only known in the unperturbed basis, a unitary transformation must be found to perform the change of basis. The unitary transformation and the energy of the perturbed states are found by solving an eigenvalue problem. Here, we consider this problem for a field  $\mathbf{F}$  of arbitrary orientation. The special case of a field along the  $z$  direction applies to the quasi-static field from ions in the standard theory.

The perturbed states are a solution to the following Schrödinger equation

$$H_a(\mathbf{F})|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle , \quad (7.8.1)$$

where  $|\alpha\rangle$  corresponds to the normalized quantum state, with energy  $E_\alpha$ , of the perturbed helium. The perturbed states are projected into the subspace of  $|a\rangle$  unperturbed upper states

$$|\alpha\rangle = \sum_a \langle a|\alpha\rangle |a\rangle , \quad (7.8.2)$$

where  $\langle a|\alpha\rangle$  are the transformation coefficients from the unperturbed to the perturbed basis, which is normalized such that  $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ .

By combining Equations (7.8.1) and (7.8.2), and by multiplying the resulting equation by the unperturbed state set  $\langle a'|$ , we obtain the following eigenvalue problem

$$\sum_{a'} (\Omega_{aa'} - E_\alpha \delta_{aa'}) \langle a'|\alpha\rangle = 0 , \quad (7.8.3)$$

where

$$\Omega_{aa'} = \mathbf{F} \cdot \langle a|\mathbf{d}|a'\rangle + E_a \delta_{aa'} \quad (7.8.4)$$

is Hermitian, with real eigenvalues  $E_\alpha$ . The eigenvectors  $\langle a|\alpha\rangle$  are then normalized so that  $\langle \alpha|\alpha\rangle = 1$ . Most elements of  $\Omega$  vanish, a consequence of the properties of the Clebsch-Gordan coefficients, which also lead to selection rules for electric dipole transitions.

# Chapitre 8

---

## Conclusion

Les travaux de Genest-Beaulieu & Bergeron (2019b,a) ont mis en lumière une différence significative entre la détermination des masses spectroscopiques et photométriques des naines blanches de type DB, alors que les deux méthodes devraient retrouver des valeurs similaires. Pour résoudre ce problème, la technique semi-analytique de génération de profils de raie d'hélium neutre de Beauchamp et al. (1997) a été revisitée. Le but de ce travail fut de pouvoir traiter l'élargissement Stark avec la théorie la plus avancée actuellement disponible, développée au cours des 20 dernières années. Pour ce faire, nous avons adopté une approche impliquant le développement d'un environnement de simulation partant de principes premiers. Cette approche, nouvelle dans notre groupe de recherche, devait être élaborée avec précaution en validant chaque pas de sa création. Cela comprend l'isotropie de l'espace et des vitesses, le respect de la distribution de vitesses et du microchamp, l'invariance des propriétés globales des volumes de simulation en fonction du temps, etc. En se basant sur les travaux et résultats de Hegerfeldt & Kesting (1988), Gigoso & Cardenoso (1996) et Beauchamp et al. (1997), nous avons produit notre propre environnement de simulation qui traite correctement la dynamique des électrons et des ions et la variation locale de densité. Nous avons travaillé sur la parallélisation des calculs de cette simulation sur plusieurs processeurs afin de pouvoir produire des résultats dans un temps raisonnable.

Certains aspects, tel le bruit numérique généré dans les profils de raies, nous ont forcés à mieux comprendre l'approche numérique et ses composantes essentielles (transformée de Fourier et calcul de valeurs propres). De plus, les erreurs numériques (oscillations dans le profil) ont été traitées à l'aide de l'algorithme de lissage de Savitzky & Golay (1964), afin de conserver uniquement l'information physique du profil.

Une fois les problèmes numériques résolus, nous avons comparé les profils obtenus de nos simulations à ceux des travaux de Beauchamp et al. (1997), Gigosos & González (2009) et Lara et al. (2012) pour notre grille de profils des raies He I  $\lambda\lambda 4471$  et  $4922$ . Cette comparaison met en évidence l'effet de certaines approximations, comme l'absence de la dynamique des ions dans les profils calculés par Beauchamp et al. (1997) et la densité locale fixe de Gigosos & González (2009) et Lara et al. (2012). Cette comparaison montre aussi certains des aspects que nous devons mettre à jour (par exemple, les valeurs des éléments de matrice; Oertel & Shomo 1968).

Le processus de validation de l'environnement de simulation a permis d'explorer d'autres transitions impliquant des états supérieurs avec un nombre quantique principal  $n$  différent de 4. Nous avons commencé par le nombre quantique principal  $n = 3$  qui constitue encore un défi pour notre algorithme de génération de profils très loin des coeurs des raies et pour les raies étroites. La méthode optimale reste à être identifiée, mais une modification du temps de simulation et du nombre de volumes simulés permet une meilleure représentation de la statistique et une meilleure résolution en longueur d'onde (ou en fréquence). L'aspect problématique pour ces raies est que les composantes interdites sont loin de la composante permise (entre  $\sim 60$  et  $200 \text{ \AA}$ ). Ceci s'explique par une différence d'énergie plus importante entre les différents états supérieurs. Par la suite, quelques profils impliquant un niveau supérieur avec  $n = 5$  et  $n = 6$  ont été testés. Les profils sont bien définis mais demandent un espace mémoire beaucoup plus important, dû à l'augmentation de la taille de la matrice de recherche de valeurs propres. Puisque ces raies ne présentent pas de composantes étroites, il est possible de diminuer le temps de simulation afin de réduire l'espace mémoire requis. Une amélioration de la gestion de la mémoire est par contre nécessaire pour le futur. Malgré les problèmes encore présents, notre environnement de simulation est l'un des meilleurs dans la génération de profils de raie dans des milieux denses puisque ces résultats se comparent avec ceux de Gigosos & González (2009) et Lara et al. (2012) pour l'atome d'hélium. À l'aide de ce nouvel outil, il est maintenant possible de s'attaquer à des problèmes dans le domaine des étoiles naines blanches ou de confirmer que les profils que notre groupe de recherche utilise actuellement (pour l'hydrogène, l'hélium et l'hélium ionisée) sont valides:

- (1) La comparaison des masses photométriques et spectroscopiques en utilisant les profils de raies de Beauchamp et al. (1997) et ceux produits à partir de nos simulations

numériques. Présentement, cette étude est impossible à réaliser en raison du nombre restreint de profils de raies d'hélium ayant été produits dans le cadre de ce projet. Toutefois, si les raies les plus importantes des spectres sont générées par simulation, il sera possible de noter l'influence des modifications des profils dans la détermination des paramètres physiques spectroscopiques.

- (2) La production de profils de raies d'hydrogène. Dans les travaux de Genest-Beaulieu & Bergeron (2019b), une déviation systématique entre la technique photométrique et spectroscopique a également été relevée pour les naines blanches de type DA. Son origine est encore inconnue, mais en utilisant notre environnement de simulation pour produire des raies d'hydrogène, il sera possible de les comparer avec ceux utilisés dans leurs modèles d'atmosphère pour voir si les profils Stark sont problématiques pour l'atome d'hydrogène.
- (3) La confirmation des profils Stark d'hélium ionisé pour les naines blanches de type DO. Ces profils de raies devraient être similaires à ceux de l'atome d'hydrogène puisque l'hélium ionisé est dit hydrogénoïde. Toutefois, à l'intérieur des approximations de nos simulations numériques, les trajectoires classiques doivent être hyperboliques plutôt que rectilignes, puisque l'émetteur n'est pas neutre. Une telle exploration pourrait confirmer la validité des profils déjà utilisés, et permettrait également de rendre notre simulation plus versatile, en couvrant un plus grand éventail de situations.
- (4) Le traitement de l'élargissement van der Waals dans les naines blanches froides. Pour les naines blanches de type DB, cet élargissement couvre un petit intervalle de température effective (entre  $\sim 12,000$  K et  $15,000$  K), mais est grandement problématique selon les travaux de Genest-Beaulieu & Bergeron (2019a). L'élargissement van der Waals repose, comme l'élargissement Stark, sur un potentiel électrostatique, mais cette fois-ci produit par les particules neutres au lieu des ions et des électrons. Son traitement nécessitera une étude approfondie des travaux de Allard et al. (1999, 2016) pour représenter correctement ce nouveau potentiel dans le cadre de simulations numériques.
- (5) Raffinement des profils de He I. En ce moment, seule l'interaction dipolaire est considérée dans nos profils. Toutefois, de légères corrections peuvent être apportées en considérant également les effets de l'interaction quadrupolaire (Gomez, 2017) et

l'élargissement causé par les niveaux inférieurs. Cette interaction supplémentaire nécessitera l'ajout de la dérivée du champ électrique dans le potentiel  $V(t)$ .

- (6) Correction des effets quantiques des collisions près de l'émetteur. L'une de nos approximations impose que les perturbateurs de notre simulation soient traités comme des particules classiques. Toutefois, si un des perturbateurs est très près de l'émetteur, une correction approximative quant aux effets quantiques peut être incluse. Cela permet de conserver le traitement des perturbateurs classiques tout en ayant un traitement légèrement plus représentatif de l'espace entourant l'émetteur.
- (7) Analyse des spectres à haute résolution. Certains spectres tels ceux de Klein et al. (2020, en préparation) ont une assez haute résolution spectrale pour la raie He I  $\lambda 5877$  qui nous permettrait de déterminer si le coeur de la raie peut être représenté par la dynamique des ions qui est incluse dans notre simulation, ou bien par un autre mécanisme physique. Ces spectres sont les outils les plus importants afin de tester les améliorations de la physique incluse dans nos simulations numériques.

L'environnement de simulation conçu dans ce mémoire représente un outil fondamental ouvrant de nouvelles pistes de recherche dans l'étude des processus d'élargissement des profils de raies dans des milieux denses. Les étoiles naines blanches représentent le laboratoire idéal pour valider nos progrès dans ce domaine, puisque de nombreux processus d'élargissements de raies y sont présents dans des conditions physiques extrêmes. Au final, avec une meilleure compréhension de la physique des étoiles naines blanches, nous espérons obtenir une meilleure cohérence entre les paramètres physiques (température effective, gravité de surface, masse) mesurés à partir des méthodes spectroscopique et photométrique pour les naines blanches de type DA et DB.

# Bibliographie

---

- Alexiou, S., Glenzer, S., & Lee, R. W. 1999a, *Phys. Rev. E*, 60, 6238
- Alexiou, S., Sauvan, P., Poquéresse, A., Leboucher-Dalimier, E., & Lee, R. W. 1999b, *Phys. Rev. E*, 59, 3499
- Allard, N. F., Guillon, G., Alekseev, V. A., & Kielkopf, J. F. 2016, *A&A*, 593, A13
- Allard, N. F., Royer, A., Kielkopf, J. F., & Feautrier, N. 1999, *Phys. Rev. A*, 60, 1021
- Baranger, M. 1958a, *Physical Review*, 112, 855
- . 1958b, *Physical Review*, 111, 494
- . 1958c, *Physical Review*, 111, 481
- . 1962, *Pure and Applied Physics*, 13, 493
- Barnard, A. J., & Cooper, J. 1970, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 10, 695
- Barnard, A. J., Cooper, J., & Shamey, L. J. 1969, *A&A*, 1, 28
- Barnard, A. J., Cooper, J., & Smith, E. W. 1974, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 14, 1025
- . 1975, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 15, 429
- Beauchamp, A. 1995, Ph.D. Thesis (Université de Montréal)
- Beauchamp, A., Wesemael, F., & Bergeron, P. 1997, *ApJS*, 108, 559
- Beauchamp, A., Wesemael, F., Bergeron, P., Liebert, J., & Saffer, R. A. 1996, *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, Vol. 96, *The DB and DBA white dwarfs: epitomes of hydrogen-deficient stars*, ed. C. S. Jeffery & U. Heber, 295
- Bedin, L. R., Salaris, M., Piotto, G., et al. 2009, *ApJ*, 697, 965
- . 2005, *ApJ*, 624, L45
- Ben Chaouacha, H., Sahal-Bréchet, S., & Ben Nessib, N. 2007, *A&A*, 465, 651
- Bergeron, P., Dufour, P., Fontaine, G., et al. 2019, *ApJ*, 876, 67
- Bergeron, P., Leggett, S. K., & Ruiz, M. T. 2001, *ApJS*, 133, 413
- Bergeron, P., Ruiz, M. T., & Leggett, S. K. 1997, *ApJS*, 108, 339

- Bergeron, P., Saffer, R. A., & Liebert, J. 1992, *ApJ*, 394, 228
- Bergeron, P., Wesemael, F., Dufour, P., et al. 2011, *ApJ*, 737, 28
- Calisti, A., Stamm, R., & Talin, B. 1988, *Phys. Rev. A*, 38, 4883
- Cukanovaite, E., Tremblay, P. E., Freytag, B., Ludwig, H. G., & Bergeron, P. 2018, *MNRAS*, 481, 1522
- Dimitrijevic, M. S., & Sahal-Brechot, S. 1984, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 31, 301
- Einarsson, B. 1968, *BIT Numerical Mathematics*, 8
- Eisenstein, D. J., Liebert, J., Koester, D., et al. 2006a, *AJ*, 132, 676
- Eisenstein, D. J., Liebert, J., Harris, H. C., et al. 2006b, *ApJS*, 167, 40
- Ferri, S., Calisti, A., Mossé, C., et al. 2014, *Atoms*, 2, 299
- Fontaine, G., Brassard, P., & Bergeron, P. 2001, *PASP*, 113, 409
- Fontaine, G., Villeneuve, B., & Wilson, J. 1981, *ApJ*, 243, 550
- Fox, M. 2006, *Quantum optics : An introduction* (Oxford university Press)
- Frerichs, M. R. 1989, *Zeitschrift fur Physik D Atoms Molecules Clusters*, 11, 315
- Gaia Collaboration, Brown, A. G. A., Vallenari, A., et al. 2018a, *A&A*, 616, A1
- Gaia Collaboration, Babusiaux, C., van Leeuwen, F., et al. 2018b, *A&A*, 616, A10
- García-Berro, E., Torres, S., Althaus, L. r. G., et al. 2010, *Nature*, 465, 194
- Genest-Beaulieu, C., & Bergeron, P. 2019a, *ApJ*, 882, 106
- . 2019b, *ApJ*, 871, 169
- Gianninas, A., Bergeron, P., & Ruiz, M. T. 2011, *ApJ*, 743, 138
- Gianninas, A., Curd, B., Thorstensen, J. R., et al. 2015, *MNRAS*, 449, 3966
- Gieske, H. A., & Griem, H. R. 1969, *ApJ*, 157, 963
- Gigosos, M. A. 2014, *Journal of Physics D Applied Physics*, 47, 343001
- Gigosos, M. A., & Cardenoso, V. 1996, *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, 29, 4795
- Gigosos, M. A., & Cardenoso, V. 1987, *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, 20, 6005
- Gigosos, M. A., Fraile, J., & Torres, F. 1985, *Phys. Rev. A*, 31, 3509
- Gigosos, M. A., & González, M. Á. 2009, *A&A*, 503, 293
- Gigosos, M. A., González, M. Á., & Cardenoso, V. 2003, *Spectrochimica Acta*, 58, 1489
- Gigosos, M. A., González-Herrero, D., Lara, N., et al. 2018, *Phys. Rev. E*, 98, 033307

- Gomez, T. A. 2017, Ph.D. Thesis (University of Texas)
- Griem, H. R. 1968, *ApJ*, 154, 1111
- Griem, H. R. 1974, *Spectral line broadening by plasmas* (Academic Press)
- Griem, H. R., Baranger, M., Kolb, A. C., & Oertel, G. 1962, *Physical Review*, 125, 177
- Griffiths, D. J. 2017, *Introduction to Quantum Mechanics* (Cambridge university press)
- Halenka, J., & Olchawa, W. 1996, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 56, 17
- Halenka, J., Olchawa, W., Grabowski, B., & Gajda, F. 2002, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 74, 539
- Hansen, B. M. S. 1999, *ApJ*, 520, 680
- Hansen, B. M. S., Brewer, J., Fahlman, G. G., et al. 2002, *ApJ*, 574, L155
- Hansen, B. M. S., Richer, H. B., Fahlman, G. G., et al. 2004, *ApJS*, 155, 551
- Hansen, B. M. S., Anderson, J., Brewer, J., et al. 2007, *ApJ*, 671, 380
- Hegerfeldt, G. C., & Kesting, V. 1988, *Phys. Rev. A*, 37, 1488
- Holtsmark, J. 1919, *Annalen der Physik*, 363, 577
- Hooper, C. F. 1968, *Physical Review*, 169, 193
- Kepler, S. O., Kleinman, S. J., Nitta, A., et al. 2007, *MNRAS*, 375, 1315
- Kepler, S. O., Pelisoli, I., Koester, D., et al. 2019, *MNRAS*, 486, 2169
- Koester, D., & Kepler, S. O. 2015, *A&A*, 583, A86
- Kolb, A. C., & Griem, H. 1958, *Physical Review*, 111, 514
- Lamb, D. Q., & van Horn, H. M. 1975, *ApJ*, 200, 306
- Landau, L., & Lifshitz, E. 1969, *Statistical physics* (Pergamon Press)
- Lara, N., González, M. Á., & Gigosos, M. A. 2012, *A&A*, 542, A75
- Leggett, S. K., Ruiz, M. T., & Bergeron, P. 1998, *ApJ*, 497, 294
- Lorentz, H. A. 1906, *Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen Proceedings Series B Physical Sciences*, 8, 591
- Mihalas, D. 1978, *Stellar atmospheres*
- Oertel, G. K., & Shomo, L. P. 1968, *ApJS*, 16, 175
- Olchawa, W. 2002, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 74, 417
- Olchawa, W., Olchawa, R., & Grabowski, B. 2004, *European Physical Journal D*, 28, 119
- Omar, B., Günter, S., Wierling, A., & Röpke, G. 2006, *Phys. Rev. E*, 73, 056405
- Oswalt, T. D., Smith, J. A., Wood, M. A., & Hintzen, P. 1996, *Nature*, 382, 692

- Poquérusse, A., Alexiou, S., & Klodzh, E. 1996, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 56, 153
- Prandtl, L. 1925, *Zeitschrift Angewandte Mathematik und Mechanik*, 5, 136
- Press, W., Teukolsky, S., Vetterling, W., & Flannery, B. 2007, *Numerical Recipes: the art of scientific computing* (Cambridge University Press)
- Renedo, I., Althaus, L. G., Miller Bertolami, M. M., et al. 2010, *ApJ*, 717, 183
- Richer, H. B., Fahlman, G. G., Rosvick, J., & Ibata, R. 1998, *ApJ*, 504, L91
- Rose, M. 1957, *Elementary theory of angular momentum* (John Wiley & Sons, New York)
- Sahal-Brechot, S. 1969a, *A&A*, 1, 91
- . 1969b, *A&A*, 2, 322
- Savitzky, A., & Golay, M. J. E. 1964, *Analytical Chemistry*, 36, 1627
- Schoning, T. 1994, *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, 27, 4501
- Seidel, J., & Stamm, R. 1982, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 27, 499
- Shamey, L. J. 1969, PhD thesis, University of Colorado at Boulder.
- Smith, E., Vidal, C., & Cooper, J. 1969, *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 73A
- Smith, E. W., Cooper, J., & Vidal, C. R. 1969, *Physical Review*, 185, 140
- Sorge, S., & Günter, S. 2000, *European Physical Journal D*, 12, 369
- Stamm, R., & Smith, E. W. 1984, *Phys. Rev. A*, 30, 450
- Stamm, R., & Voslamber, D. 1979, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 22, 599
- Tonry, J. L., Stubbs, C. W., Lykke, K. R., et al. 2012, *ApJ*, 750, 99
- Tremblay, P. E., & Bergeron, P. 2009, *ApJ*, 696, 1755
- Tremblay, P. E., Bergeron, P., & Gianninas, A. 2011a, *ApJ*, 730, 128
- Tremblay, P. E., Ludwig, H. G., Steffen, M., Bergeron, P., & Freytag, B. 2011b, *A&A*, 531, L19
- Tremblay, P. E., Ludwig, H. G., Steffen, M., & Freytag, B. 2013, *A&A*, 559, A104
- Vidal, C. R., Cooper, J., & Smith, E. W. 1970, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 10, 1011
- von Hippel, T., & Gilmore, G. 2000, *AJ*, 120, 1384
- Voss, B., Koester, D., Napiwotzki, R., Christlieb, N., & Reimers, D. 2007, *A&A*, 470, 1079
- Winget, D. E., Hansen, C. J., Liebert, J., et al. 1987, *ApJ*, 315, L77
- Wood, M. A. 1992, *ApJ*, 386, 539

- Wujec, T., Jazgara, A., Halenka, J., & Musielok, J. 2003, The European Physical Journal D  
- Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics, 23, 405
- Wujec, T., Olchawa, W., Halenka, J., & Musielok, J. 2002, Phys. Rev. E, 66, 066403
- Ya'akobi, B., George, E. V., Bekefi, G., & Hawryluk, R. J. 1972, Journal of Physics B Atomic  
Molecular Physics, 5, 1017



# Annexe A

---

## Transformée de Fourier numérique

La transformée de Fourier est un outil très important pour la simulation numérique. Elle permet de passer de l'espace temporel (simulation) à celui des fréquences (profil de raie). La transformée de Fourier d'une fonction  $f(t)$  est décrite par l'intégrale suivante

$$I = \int_a^b e^{i\omega t} f(t) dt. \quad (\text{A.0.1})$$

La fonction  $f(t)$  ne possède généralement pas une forme permettant d'effectuer analytiquement sa transformée de Fourier. Il arrive également que les valeurs de la fonction ne soient disponibles que pour un ensemble discret de points, rendant impossible l'utilisation de l'intégrale. L'approche à prendre dans ces cas est de discrétiser l'intégrale de l'équation A.0.1 en divisant l'intervalle entre  $a$  et  $b$  en  $M$  sous-intervalles de même largeur

$$\Delta = \frac{b-a}{M}, \quad t_j = a + j\Delta, \quad f_j = f(t_j), \quad j = 0, \dots, M. \quad (\text{A.0.2})$$

Avec ces définitions, l'intégrale de l'équation A.0.1 s'approxime par une sommation d'éléments discrets

$$I \sim \Delta \sum_{j=0}^{M-1} f_j e^{i\omega t_j}. \quad (\text{A.0.3})$$

La technique la plus utilisée pour faire la sommation est l'algorithme de la FFT (*Fast Fourier Transform*, Press et al., 2007) dû à sa rapidité d'exécution. Par contre, il est important de définir un ensemble particulier de fréquences  $\omega$  pour que la FFT soit valide

$$\omega_m \Delta = \frac{2\pi m}{M}, \quad (\text{A.0.4})$$

où  $m = 0, 1, \dots, M/2 - 1$  et  $M$  sont des entiers. On obtient alors, en combinant les équations A.0.2 à A.0.4, une expression simple pour décrire la transformée de Fourier

$$I(\omega_m) \sim \Delta e^{i\omega_m a} \sum_{j=0}^{M-1} f_j e^{2\pi i m j / M} = \Delta e^{i\omega_m a} [FFT(f_0 \dots f_{M-1})]_m. \quad (\text{A.0.5})$$

Cette expression n'est cependant pas toujours une bonne approximation de l'intégrale initiale décrite par l'équation A.0.1 (Press et al., 2007). Ceci est le cas lorsque l'intégrande de l'équation A.0.1 est de nature oscillatoire ou lorsque la valeur de  $\omega_m$  est assez grande pour contenir plusieurs cycles dans l'intervalle  $a$  à  $b$ . La conséquence est alors une plus petite valeur de  $I$  pouvant facilement être dominée par les erreurs des approximations menant à une forme discrète de la transformée de Fourier (Press et al., 2007). Le problème de l'intégrale de l'équation A.0.1 doit alors être approché d'une autre façon.

Dans notre situation, seule la partie réelle de la transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation (équation 3.2.4), qui est une fonction complexe, est nécessaire pour la production du profil de raie. Nous développerons alors ce cas particulier, permettant d'exprimer l'intégrale  $I$  de la manière suivante

$$\text{Re } I = \int_a^b [A(t) \cos \omega t - B(t) \sin \omega t] dt, \quad (\text{A.0.6})$$

où  $A(t)$  et  $B(t)$  sont les parties réelle et imaginaire de  $f(t)$ , respectivement. Il y a donc deux intégrales très similaires à résoudre, soit une avec un cosinus et l'autre avec un sinus. Puisque le raisonnement est similaire pour les deux intégrandes, nous ne traitons que l'intégrale avec le cosinus en guise d'exemple.

Au lieu d'effectuer une intégrale discrète directement avec les valeurs des parties réelle et imaginaire de la fonction  $f(t)$ , il est possible d'utiliser le fait que ces parties doivent être lisses et continues. Dans une approche numérique, il est seulement possible de traiter des points discrets et non la fonction dans son ensemble. Avec ces contraintes, la méthode d'intégration la plus connue est celle de Filon, qui consiste à définir une spline passant par les valeurs discrètes de  $A(t)$ , et de faire l'intégrale de Fourier analytiquement. Nous avons choisi plus spécifiquement l'interpolation cubique comme définition de la spline qui est donnée, pour un intervalle  $[t_{j-1}, t_j]$  par (Einarsson, 1968)

$$\begin{aligned}
S(t) = & M_{j-1} \frac{(t_j - t)^3}{6h_j} + M_j \frac{(t - t_{j-1})^3}{6h_j} \\
& + \left( y_{j-1} - \frac{M_{j-1}h_j^2}{6} \right) \frac{t_j - t}{h_j} + \left( y_j - \frac{M_j h_j^2}{6} \right) \frac{t - t_{j-1}}{h_j}
\end{aligned} \tag{A.0.7}$$

où  $h_j = t_j - t_{j-1}$  pour  $j = 1, 2, \dots, N$ , où  $N + 1$  est le nombre de points dans l'intervalle utilisé pour effectuer l'interpolation de la fonction  $A(t)$ . Aussi, la quantité  $M_j$  est définie par la contrainte de continuité de la dérivée de  $S$  à  $x_j$  pour  $j = 1, 2, \dots, N - 1$  (Einarsson, 1968)

$$\frac{h_j}{6} M_{j-1} + \frac{h_j + h_{j-1}}{3} M_j + \frac{h_{j+1}}{6} M_{j+1} = \frac{y_{j+1} - y_j}{h_{j+1}} - \frac{y_j - y_{j-1}}{h_j}. \tag{A.0.8}$$

Les deux autres conditions permettant de décrire la valeur de  $M_j$  sont les contraintes  $S'(a) = f'(a)$  et  $S'(b) = f'(b)$ . En remplaçant la fonction  $A(t)$  par son interpolation associée, on réécrit l'intégrale à effectuer

$$\begin{aligned}
\int_a^b S(t) \cos \omega t dt = & \left[ \frac{1}{\omega} S(t) \sin \omega t + \frac{1}{\omega^2} S'(t) \cos \omega t \right. \\
& \left. - \frac{1}{\omega^3} S''(t) \sin \omega t \right]_a^b + \frac{1}{\omega^3} \int_a^b S'''(t) \sin \omega t dt,
\end{aligned} \tag{A.0.9}$$

où  $S^{(n)}(t)$  est la nième dérivée de l'équation A.0.7 par rapport à  $t$ , et la dernière intégrale est donnée par

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\omega^3} \int_a^b S'''(t) \sin \omega t dt = & \frac{1}{\omega^3} \sum_{j=1}^N \int_{x_{j-1}}^{x_j} \frac{M_j - M_{j-1}}{h_j} \sin \omega t dt \\
= & - \frac{1}{\omega^4} \sum_{j=1}^N \frac{M_j - M_{j-1}}{h_j} [\cos \omega t_j - \cos \omega t_{j-1}],
\end{aligned}$$

où l'on a divisé l'intervalle de  $a$  à  $b$  en  $N$  intégrales afin de respecter la définition de la spline en l'évaluant.

Au final, après des ajustements pour améliorer le calcul numérique, Einarsson (1968) obtient la solution suivante pour l'intégrale en cosinus

$$\begin{aligned}
\int_a^b S(t) \cos \omega t dt &= \frac{h}{1 - \frac{2}{3} \sin^2 \left( \frac{\omega h}{2} \right)} \left\{ [\alpha y_N - \beta M_N] \sin \omega b - [\alpha y_0 - \beta M_0] \sin \omega a \right. \\
&+ \left[ \gamma y_N - \delta \left( y_{N-1} - \frac{h^2}{3} M_N - \frac{h^2}{6} M_{N-1} \right) \right] \cos \omega b \\
&+ \left. \left[ \gamma y_0 - \delta \left( y_1 - \frac{h^2}{3} M_0 - \frac{h^2}{6} M_1 \right) \right] \cos \omega a + \epsilon \sum_{j=1}^{N-1} y_j \cos \omega t_j \right\}, \tag{A.0.10}
\end{aligned}$$

où les valeurs de  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$  et  $\epsilon$  sont données par les équations suivantes si la fréquence  $\omega$  est grande comparativement à 0

$$\begin{aligned}
\alpha &= \frac{1}{\theta} \left( 1 - \frac{2}{3} \sin^2 \frac{\theta}{2} - \frac{\sin^2 \frac{\theta}{2} \sin \theta}{\left( \frac{\theta}{2} \right)^2 \theta} \right) \\
\beta &= \frac{h^2}{\theta^3} \left( 1 - \frac{2}{3} \sin^2 \frac{\theta}{2} - \frac{\sin \theta}{\theta} \right) \\
\gamma &= \frac{1}{\theta^2} \left( 1 - \frac{2}{3} \sin^2 \frac{\theta}{2} - \frac{\sin^2 \frac{\theta}{2} \cos \theta}{\left( \frac{\theta}{2} \right)^2} \right) \\
\delta &= \frac{1}{\theta^2} \left( 1 - \frac{2}{3} \sin^2 \frac{\theta}{2} - \frac{\sin^2 \frac{\theta}{2}}{\left( \frac{\theta}{2} \right)^2} \right) \\
\epsilon &= \frac{\sin^4 \frac{\theta}{2}}{\left( \frac{\theta}{2} \right)^4},
\end{aligned}$$

où  $\theta = \omega h$ . Il est possible de faire le même développement avec l'intégrale en sinus afin d'obtenir la deuxième moitié de la transformée de Fourier

$$\begin{aligned}
\int_a^b S(t) \sin \omega t dt &= \frac{h}{1 - \frac{2}{3} \sin^2 \left( \frac{\omega h}{2} \right)} \left\{ -[\alpha y_N - \beta M_N] \cos \omega b + [\alpha y_0 - \beta M_0] \cos \omega a \right. \\
&+ \left[ \gamma y_N - \delta \left( y_{N-1} - \frac{h^2}{3} M_N - \frac{h^2}{6} M_{N-1} \right) \right] \sin \omega b \\
&+ \left. \left[ \gamma y_0 - \delta \left( y_1 - \frac{h^2}{3} M_0 - \frac{h^2}{6} M_1 \right) \right] \sin \omega a + \epsilon \sum_{j=1}^{N-1} y_j \sin \omega t_j \right\}, \tag{A.0.11}
\end{aligned}$$

où la spline  $S(t)$  est différente pour la partie imaginaire et la partie réelle de la fonction  $f(t)$  d'origine.

À l'aide des équations A.0.10 et A.0.11, la transformée de Fourier numérique peut être effectuée sans la technique problématique de la FFT. Notre équation complète de la transformée de Fourier est alors la suivante

$$I = \int_a^b S_A(t) \cos \omega t dt - \int_a^b S_B(t) \sin \omega t dt, \quad (\text{A.0.12})$$

où les fonctions  $S_A(t)$  et  $S_B(t)$  sont les splines de la partie réelle et imaginaire de la fonction  $f(t)$ . Dans le cadre de ce mémoire, la transformée de Fourier à évaluer est celle de la fonction d'autocorrélation  $C(t)$ .

## A.1. Problèmes numériques de la transformée de Fourier

Pour que la transformée de Fourier soit rigoureuse entre les deux espaces, la fonction sur laquelle est appliquée la transformée doit être continue et définie sur l'ensemble des valeurs physiquement possible de l'espace initial. Le problème avec cette définition est que les critères de la transformation sont impossibles à respecter si la transformation est effectuée numériquement. Des déviations causées par les procédures numériques par rapport à la transformée analytique — si elle est possible à effectuer — sont inévitables.

Dans cette section, nous étudierons, dans le cas particulier de la technique de Filon, les problèmes numériques pouvant provenir de l'intégration numérique d'une fonction discrète, en fonction de la grandeur du pas de temps définissant chacun de ses points dans un intervalle de temps donné. Aussi, nous regarderons ceux pouvant provenir d'une intégration d'une fonction numérique dans l'espace temporel sur un temps fini.

### A.1.1. Discrétisation de l'espace

Pour considérer l'effet d'un espace temporel discret lors de la transformée, nous traiterons du cas limite où le pas de temps  $h$  tend vers  $\zeta$ , qui est très petit mais non nul, afin que l'utilisation d'une spline discrète soit justifiée (Einarsson, 1968), en partant du temps  $t = 0$  (donc la borne inférieure de l'intégrale sera  $a = 0$ ). Dans cette analyse, les termes en  $\zeta^2$  ou d'ordre plus élevé seront négligés. Ceci doit être effectué avec précaution, car la variable  $\omega$  peut être du même ordre de grandeur que l'inverse de la valeur du pas de temps. Afin de mieux comprendre la transformée de Fourier discrète, nous examinerons le comportement du profil  $I$  dans trois régimes de fréquences: (1)  $\omega \sim \zeta^{-1}$ , (2)  $\omega < \zeta^{-1}$  et (3)  $\omega \ll \zeta^{-1}$ .

Tout d'abord, il est nécessaire d'exprimer l'ensemble des termes  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$  et  $\epsilon$  en leur série de Taylor autour du point  $\omega = 0$ . Nous obtenons

$$\begin{aligned}
\alpha &\sim \frac{\omega h}{12} - \frac{\omega^3 h^3}{90} \\
\beta &\sim \frac{\omega h^3}{180} - \frac{\omega^3 h^5}{3780} \\
\gamma &\sim \frac{5}{12} - \frac{13}{180} \omega^2 h^2 + \frac{353}{60480} \omega^4 h^4 \\
\delta &\sim -\frac{1}{12} + \frac{\omega^2 h^2}{90} + \frac{5}{12096} \omega^4 h^4 \\
\epsilon &\sim 1 - \frac{\omega^2 h^2}{6} + \frac{\omega^4 h^4}{80}.
\end{aligned}$$

À l'aide de ces nouvelles définitions il sera possible d'étudier le comportement global du profil dans différente plage de valeur de  $\omega$ . Regardons d'abord la limite de  $h \rightarrow \zeta$  de l'équation A.0.12 dans le cas où  $\omega$  est du même ordre de grandeur que l'inverse de la valeur du pas de temps ( $\omega \sim \zeta^{-1}$ )

$$\begin{aligned}
\lim_{h \rightarrow \zeta} I &\sim \frac{\zeta}{1 - \left(\frac{\omega^2 \zeta^2}{6} - \frac{\omega^4 \zeta^4}{48}\right)} \left\{ \left[ \frac{\omega \zeta}{12} - \frac{\omega^3 \zeta^3}{90} \right] (y_{N,A} \sin \omega b + y_{N,B} \cos \omega b) \right. \\
&+ \left[ \frac{1}{2} - \frac{\omega \zeta}{12} - \frac{\omega^2 \zeta^2}{12} + \frac{\omega^3 \zeta^3}{90} + \frac{\omega^4 \zeta^4}{160} \right] \\
&\left. + \left[ 1 - \frac{\omega^2 \zeta^2}{6} - \frac{\omega^4 \zeta^4}{80} \right] (C_A(\omega) - C_B(\omega)) \right\}, \tag{A.1.1}
\end{aligned}$$

où  $y_{N,A}$  et  $y_{N,B}$  sont les valeurs du dernier point de la spline de la partie réelle et imaginaire de la fonction complexe  $C(t)$ , respectivement. Dans le régime de fréquence décrit par cette équation, la transformée de Fourier discrète n'est pas une bonne représentation de la transformée de Fourier continue. En effet, pour ces valeurs de fréquences, le profil présente des termes polynomiaux pouvant dominer la contribution de la fonction  $C(t)$ . Un moyen simple de diminuer l'importance de ce régime est de faire en sorte que les fréquences décrites dans la fonction  $C(t)$  soient autour de  $\omega = 0$ .

Pour bien reproduire la fonction d'autocorrélation  $C(t)$  dans un certain intervalle de fréquence, la différence d'énergie entre les niveaux supérieurs et inférieurs est utilisée. Si l'on traite le problème avec les énergies mesurées en laboratoire, nous serons dans un régime de haute fréquence. Toutefois, en définissant l'énergie de la transition permise comme étant nulle, nous rapportons le problème autour de fréquences  $\omega = 0$  en conservant les différences d'énergies relatives décrivant le profil de raie. Même avec cette procédure, il est possible que certaines composantes interdites du profil se retrouvent dans un régime où la fréquence est

légèrement plus petite que l'inverse du pas de temps ( $\omega < \zeta^{-1}$ )

$$\begin{aligned} \lim_{h \rightarrow \zeta} I \sim & \frac{\zeta}{1 - \frac{\omega^2 \zeta^2}{6}} \left\{ \left[ \frac{\omega \zeta}{12} \right] (y_{N,A} \sin \omega b + y_{N,B} \cos \omega b) \right. \\ & \left. + \left[ \frac{1}{2} - \frac{\omega \zeta}{12} - \frac{\omega^2 \zeta^2}{12} \right] + \left[ 1 - \frac{\omega^2 \zeta^2}{6} \right] (C_A(\omega) - C_B(\omega)) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.1.2})$$

Si la fonction d'autocorrélation a convergé vers une valeur de 0, l'équation ci-dessus peut être décrite de la manière suivante

$$\lim_{h \rightarrow \zeta} I \sim \frac{\zeta}{1 - \frac{\omega^2 \zeta^2}{6}} \left\{ \left[ \frac{1}{2} - \frac{\omega \zeta}{12} - \frac{\omega^2 \zeta^2}{12} \right] \right\} + \zeta (C_A(\omega) - C_B(\omega)). \quad (\text{A.1.3})$$

Cette équation nous indique que, dans ce régime, un polynôme est superposé au signal de l'intégrale discrète approximée au premier ordre (voir l'équation A.0.3). L'erreur sur le profil, dans l'espace des fréquences, sera alors de l'ordre du pas de temps. Ce n'est alors qu'au cœur du profil où l'erreur devient la moins importante, ou bien quand la fréquence est beaucoup plus petite que le pas de temps ( $\omega \ll \zeta^{-1}$ )

$$\lim_{h \rightarrow \zeta} I \sim \frac{\zeta}{2} + \zeta (C_A(\omega) - C_B(\omega)), \quad (\text{A.1.4})$$

où le terme  $\zeta (C_A(\omega) - C_B(\omega))$  domine le premier terme, nous permettant de retrouver exactement l'intégrale discrète approximée au premier ordre

$$\lim_{h \rightarrow \zeta} I \sim \zeta (C_A(\omega) - C_B(\omega)), \quad (\text{A.1.5})$$

où cette approximation n'est valide que pour une fonction quasi-continue.

### A.1.2. Transformée de Fourier tronquée

Ayant déterminé les erreurs produites par la discrétisation de l'intégrale, il est possible de regarder l'effet de l'intégration sur un temps fini dans notre situation. Afin de passer de l'équation A.1.2 à l'équation A.1.3, nous avons fait la supposition que la fonction d'autocorrélation avait convergé vers une valeur de 0 au temps  $b$ . Cela a permis de retirer le terme

$$I_{\text{bruit}} = \left[ \frac{\omega \zeta}{12} \right] (y_{N,A} \sin \omega b + y_{N,B} \cos \omega b), \quad (\text{A.1.6})$$

puisque les valeurs de  $y_{N,A}$  et  $y_{N,B}$  devenaient nulles. Ceci n'est plus nécessairement le cas lorsque l'intégration se fait sur un temps fini, puisque la forme de l'enveloppe de la fonction d'autocorrélation est proportionnelle à  $e^{-st}$ .

La contribution de l'équation A.1.6 est difficile à décrire correctement en fonction de la fréquence, mais elle n'est présente que si la dernière valeur de la fonction d'autocorrélation est non négligeable. Si le profil est centré sur une fréquence  $\omega = 0$ , ce terme peut introduire une asymétrie artificielle supplémentaire dans le profil. Les autres termes étant affectés par un temps d'intégration limité sont les  $C_A$  et  $C_B$  décrivant l'intégrale discrète. Si la fonction d'autocorrélation n'a pas convergé, cela signifie que certaines composantes du profil de raies ne sont pas entièrement décrites. Cela s'explique par le fait que la structure la plus fine du profil de raies produit ne peut pas être plus étroite que l'inverse du temps d'intégration (multiplié par  $2\pi$ ). Ceci limite alors la grille de fréquence pouvant être représentée dans l'espace des fréquences à partir de l'espace temporel.

Il est alors possible de conclure que, pour la procédure numérique de la transformée de Fourier, seules des erreurs de faibles amplitudes et sur de grandes plages de fréquences influencent les profils de raies, centrées sur  $\omega = 0$ , produits à partir d'une fonction d'autocorrélation ne présentant aucune incertitude sur ses valeurs. Ces erreurs dépendent entièrement du pas de temps décrivant la fonction d'autocorrélation ainsi que le temps de la simulation, soit deux paramètres pouvant être contrôlés afin de réduire l'influence de ces erreurs sur le profil de raie. Toutefois, si la fonction d'autocorrélation présente des incertitudes sur ces valeurs à certains temps donnés, des erreurs peuvent se présenter sur de plus petites plages de fréquences. Ces erreurs ne sont toutefois pas causées par la procédure de la transformée de Fourier numérique, mais plutôt par la construction de la fonction d'autocorrélation à partir de la statistique du système.

# Annexe B

---

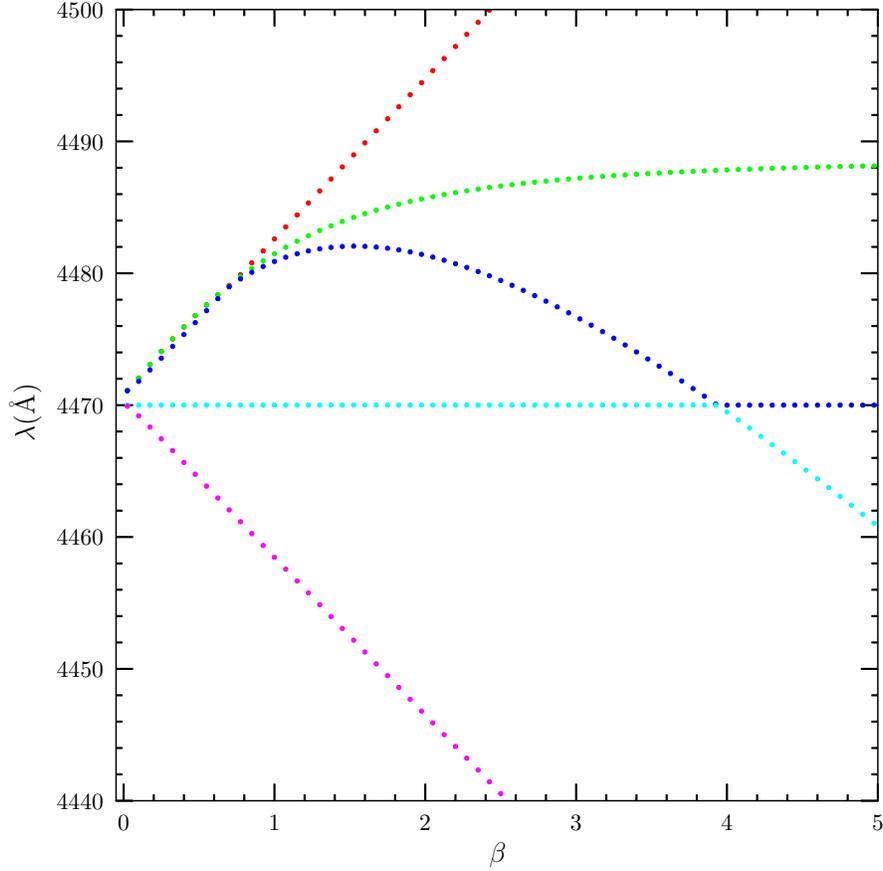
## Technique de triage des énergies

Les valeurs propres du système sont déterminées à partir d'une matrice de grande dimension. Dans l'exemple du chapitre 5, une matrice  $16 \times 16$  doit être résolue afin d'extraire 16 paires de valeurs et vecteurs propres. Ces derniers jouent un rôle très important dans la détermination de la fonction d'autocorrélation pour un temps  $t_k$  donné

$$C(t_k) = \sum_{i f a} \langle i | \mathbf{d} | f \rangle \langle f | \mathbf{d} | a \rangle \rho_i \sum_{\alpha} C_{a\alpha} \langle \alpha | \left( \prod_{g=1}^k e^{-iH_g \Delta t / \hbar} | \alpha \rangle (C_{i\alpha})^\dagger, \quad (\text{B.0.1})$$

où le niveau inférieur définit le point d'énergie nulle et où  $a$ ,  $i$  et  $f$  sont des états non perturbés et  $\alpha$  est un état perturbé de l'atome. Dans cette équation, le terme  $\langle i | \mathbf{d} | f \rangle \langle f | \mathbf{d} | a \rangle$  représente les éléments de matrice dipolaire que nous avons définis au chapitre 2 dans la base des états non perturbés. La matrice d'énergie est diagonale dans la base des états perturbés et les éléments de la diagonale sont les valeurs propres de l'atome perturbé par un champ électrique.

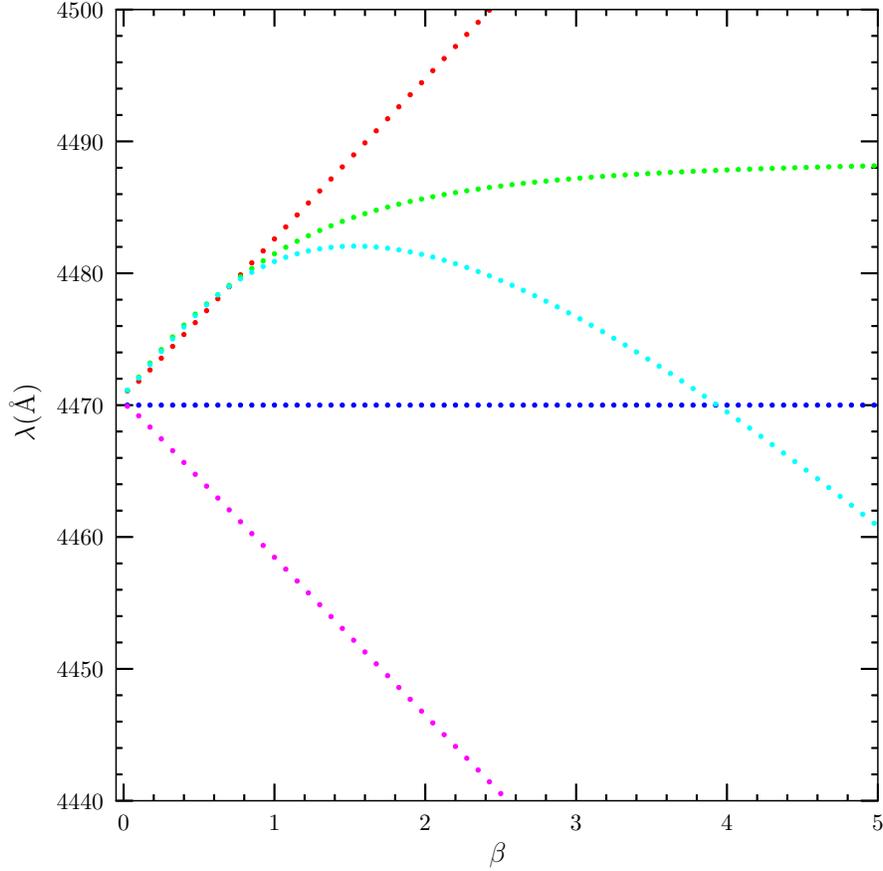
À chaque pas de temps, le champ électrique à la position de l'émetteur varie, ainsi que les valeurs et les vecteurs propres. Un des problèmes de l'algorithme de recherche de valeurs propres est qu'elles ne sont pas toujours triées dans le même ordre par rapport aux nombres quantiques, en raison du comportement des énergies en fonction du champ électrique (voir la figure B.1). Toutefois, pourvu que les valeurs propres soient correctement identifiées aux bons vecteurs propres, ce qui est toujours le cas avec l'algorithme choisi, la fonction d'autocorrélation n'est pas affectée par ce problème d'ordre par construction. Toutefois, afin de valider notre simulation à l'aide d'outils visuels et de graphiques, il est important de



**Fig. B.1.** Variation de la valeur propre en fonction du champ électrique sans technique de triage, pour le profil de raie He I  $\lambda 4471$ . Il est possible de voir qu'à certaines valeurs du champ électrique, il y a un croisement dans les valeurs propres et l'ordre des énergies change.

pouvoir mettre les énergies dans un ordre spécifique, et ce, peu importe la valeur du champ électrique.

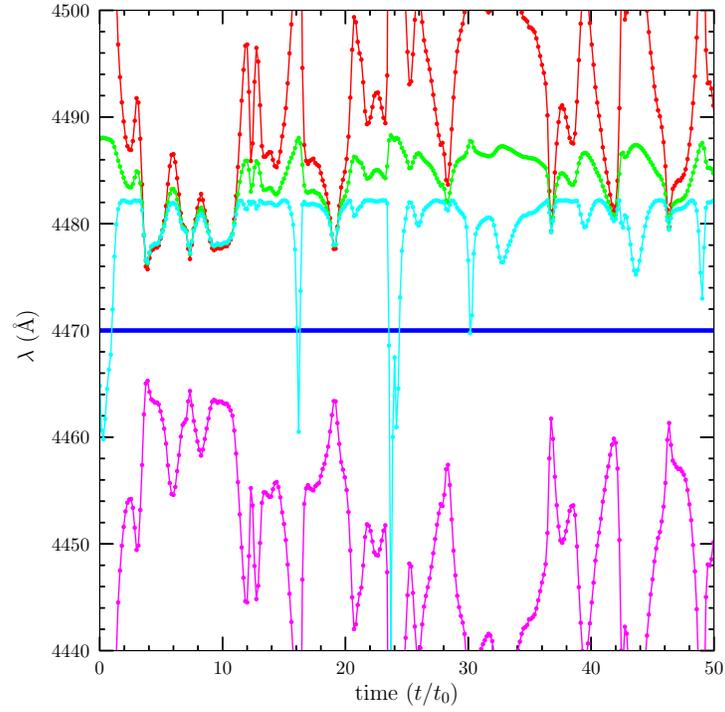
La figure B.1 montre que, pour certaines valeurs du champ électrique, il y a un croisement dans les valeurs propres de plusieurs transitions perturbées, lequel fait en sorte qu'il n'y a pas un ordre préétabli pour les valeurs propres. Ces valeurs ne doivent donc pas simplement être placées en ordre croissant ou décroissant d'énergie. Pour suivre les énergies correctement, il faut pouvoir prédire les valeurs propres pour un champ électrique donné des différentes transitions. Pour ce faire, un tableau de champ électrique est produit et les valeurs propres pour chacun de ces champs sont extraites. Le résultat est alors analogue à celui de la figure B.1. Si la grille de champ électrique choisie est assez fine, la variation des valeurs propres



**Fig. B.2.** Variation de la valeur propre en fonction du champ électrique avec la technique de triage, pour le profil de la raie de He I  $\lambda 4471$ . Il est possible de voir que malgré le croisement des valeurs propres, l'ordre demeure conservé.

d'une même transition entre deux valeurs de champs est assez faible pour être approximée par une fonction linéaire. Une pente peut être associée à cette variation, et puisque cette dernière est peu importante, deux pentes successives doivent avoir sensiblement la même valeur. En faisant le test pour l'ensemble des points, les valeurs propres peuvent être regroupées en  $n$  groupes où  $n$  est le nombre de valeurs propres obtenues en résolvant la matrice  $n \times n$ . On obtient alors la figure B.2.

Pour chacun des groupes de points, une fonction spline est produite permettant, d'évaluer la valeur propre pour tous les champs possibles dans l'intervalle de définition. À l'aide de ces  $n$  fonctions, les valeurs propres peuvent être identifiées à chaque pas de temps pour l'ensemble des transitions, et ce, peu importe la grandeur de la variation du champ électrique entre deux



**Fig. B.3.** Variation de la valeur propre en fonction du temps avec la technique de triage, pour le profil de raie de  $\lambda 4471\text{\AA}$ . En appliquant cette technique, même si la variation est très rapide, l'ordre des énergies est conservé.

pas de temps (voir la figure B.3). Nous avons utilisé cette procédure pour valider visuellement notre algorithme de recherche de valeurs propres.

# Annexe C

---

## Algorithme multi-machines

Afin de produire des profils de raie dans un intervalle de temps raisonnable, il est nécessaire de paralléliser les calculs sur un grand nombre d'ordinateurs (machines). Pour décrire le fonctionnement d'un algorithme multi-machines, nous commencerons par présenter les diverses composantes d'un ordinateur et leur fonctionnement lors de l'accomplissement d'une tâche, pour ensuite expliquer la logique de l'algorithme.

### C.1. Architecture de l'ordinateur

Lors de l'exécution d'une tâche (dans notre cas, nous considérons un code numérique), un ordinateur utilise jusqu'à trois composantes, soit:

- (1) Le processeur central (CPU). Il gère le roulement des processus de l'ordinateur. La plupart des processeurs sont divisés en plusieurs sous-processeurs appelés «coeurs». Chacun de ces coeurs peut agir comme un processeur central. Si plusieurs tâches sont exécutées, elles seront distribuées sur le nombre de coeurs disponibles. Dans le cas où le nombre de tâches est plus grand que le nombre de coeurs, l'efficacité du calcul sera diminuée pour l'ensemble de l'ordinateur.
- (2) La mémoire vive. Cette mémoire est différente de l'espace de stockage de l'ordinateur. Il s'agit de la mémoire dite «temporaire» du système pouvant être allouée à l'ensemble des tâches exécutées par le système. Si la mémoire temporaire nécessaire pour accomplir ces tâches est plus grande que celle de l'ordinateur, il ne sera plus dans la possibilité d'accomplir une action quelconque.
- (3) Le processeur graphique (GPU). L'usage de ce processeur est rare dans le domaine de la physique, puisqu'il n'est pas accédé par défaut lors de l'exécution d'une tâche. Il

est divisé en un nombre beaucoup plus grand de coeurs que le CPU. Ces coeurs sont toutefois moins performants individuellement que ceux du CPU, mais ont l'avantage de pouvoir exécuter un grand nombre de tâches en parallèle efficacement.

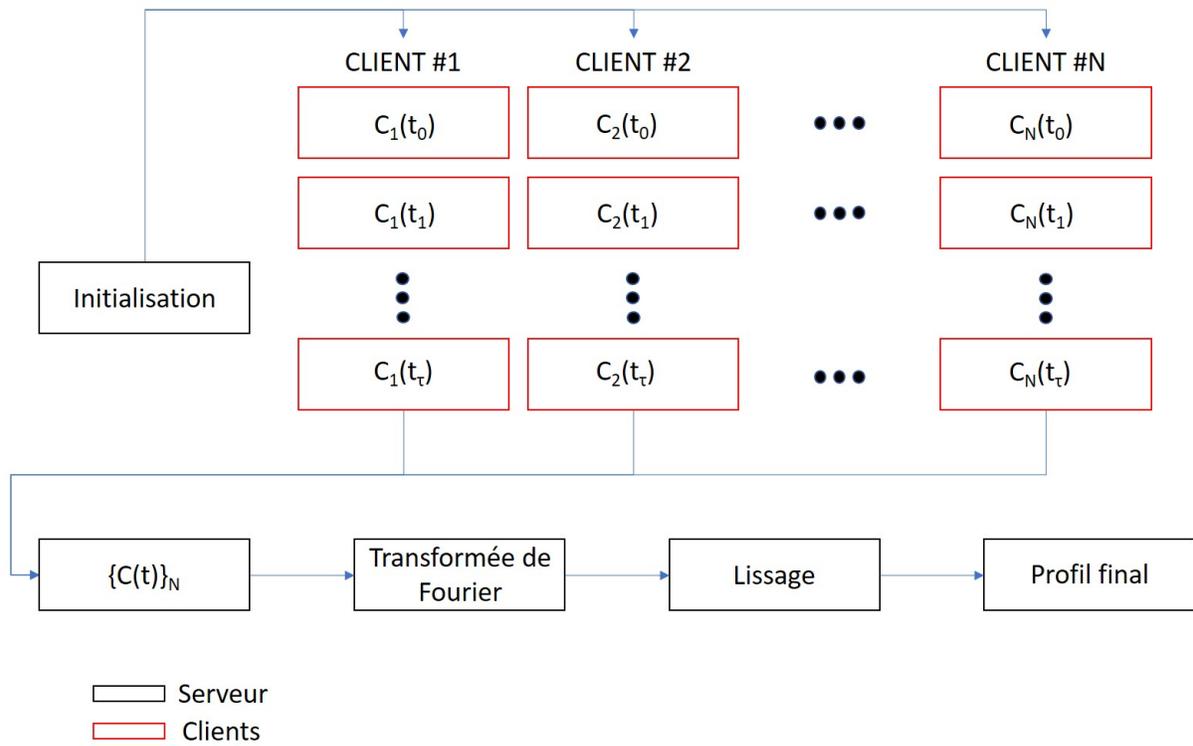
La simulation présentée n'utilise que les deux premières composantes de l'ordinateur dû à la complexité de l'implémentation du GPU dans les calculs numériques. Cela reste toutefois une option faisable afin d'améliorer la vitesse de calcul de la simulation (Gigosos et al., 2018).

## C.2. Logique de l'algorithme

Pour produire une simulation multi-machines, il est nécessaire d'implémenter au minimum deux codes numériques accomplissant deux tâches distinctes:

- (1) Un code doit gérer la distribution des tâches à exécuter aux ordinateurs. Il doit par la suite recueillir les résultats et les sauvegarder dans le format souhaité (documents textes, figure, etc.). L'ordinateur exécutant ce code est appelé le «serveur».
- (2) L'autre code doit recevoir les instructions du serveur pour ensuite exécuter la demande du serveur. Lorsque les instructions sont complétées, le résultat est retourné au serveur. L'ordinateur exécutant ce code est appelé un «client». Il est possible d'avoir un nombre très grand de clients pour un seul serveur si ce dernier est dans la possibilité d'effectuer la gestion d'un grand nombre de clients.

Pour la simulation, un nombre  $N$  de volumes indépendants évoluant pendant un nombre  $\tau$  de pas de temps permet de calculer la fonction d'autocorrélation moyennée sur l'ensemble des  $N$  volumes (équation 3.3.11). Puisque les volumes doivent être indépendants, la seule approche possible est de calculer la fonction d'autocorrélation pour chaque volume évoluant pendant  $\tau$  pas de temps par  $N$  clients (voir figure C.1). Il n'est pas nécessaire que l'ensemble des clients calcule le tout simultanément, puisque les volumes sont indépendants. Une fois que l'ensemble des  $N$  fonctions d'autocorrélation a été calculé par les clients et recueilli par le serveur, la moyenne est effectuée ainsi que la transformée de Fourier présentée à l'annexe A. Le profil et la fonction d'autocorrélation moyenne sont alors enregistrés dans des fichiers textes.



**Fig. C.1.** Schéma de l'algorithme de la simulation multi-machines. Les cases noires représentent les tâches accomplies par le serveur et les rouges par les clients. Une fois la fonction d'autocorrélation calculée, la transformée de Fourier de l'annexe A et le lissage de l'annexe D sont effectués afin d'obtenir le profil de raie final.



# Annexe D

---

## Lissage des profils dynamiques

Au chapitre 6, les profils de raies produits présentent de grandes oscillations. Ces dernières sont principalement causées par le bruit statistique de la simulation et la transformée de Fourier numérique. Puisque l'origine des oscillations est de nature numérique et non physique, il est possible de produire un algorithme permettant de lisser le profil de raie obtenu de la simulation sans perdre l'information physique. Pour ce faire, nous avons utilisé l'algorithme de lissage de Savitzky & Golay (1964). Cette annexe présente le fonctionnement de cet algorithme et de ses limitations.

### D.1. Algorithme de Savitzky-Golay

Cet algorithme a été produit dans le but de réduire l'importance des artéfacts dans un profil de raie mesuré. Il n'est pas judicieux de prendre un filtre fixe pour l'ensemble des profils en fonction de la longueur d'onde puisque les artéfacts ne sont pas nécessairement identiques d'un profil à l'autre. Savitzky & Golay (1964) règlent ce problème en définissant une petite fenêtre de longueur d'onde dite «glissante». Le choix de la taille de cette fenêtre dépend de la largeur des artéfacts comparativement à la largeur du profil. De manière générale, une bonne largeur de fenêtre doit être plus petite que celle de la largeur à mi-hauteur de la raie (préférentiellement beaucoup plus petite) et plus grande que la largeur moyenne des artéfacts. Ici, la largeur doit être un nombre impair de points.

Une fois la taille de la fenêtre choisie, elle doit être centrée sur un point des données. Un polynôme de degré 2 ou 3 est par la suite ajusté à l'intérieur de la fenêtre. Le point central, et seulement le point central, de la fenêtre prend la valeur correspondante à l'ajustement. Par la suite, la fenêtre est centrée avec le point suivant, reproduisant le même procédé. Le choix du

degré du polynôme dépend du type de profil étudié. Le polynôme de degré 2 permet de tenir compte de la courbure générale des données alors que celui de degré 3 permet de représenter les points d'inflexions. Il est toujours préférable de prendre le degré du polynôme le plus bas afin de réduire le plus possible les artéfacts. Un exemple de la procédure est illustré à la figure D.1.

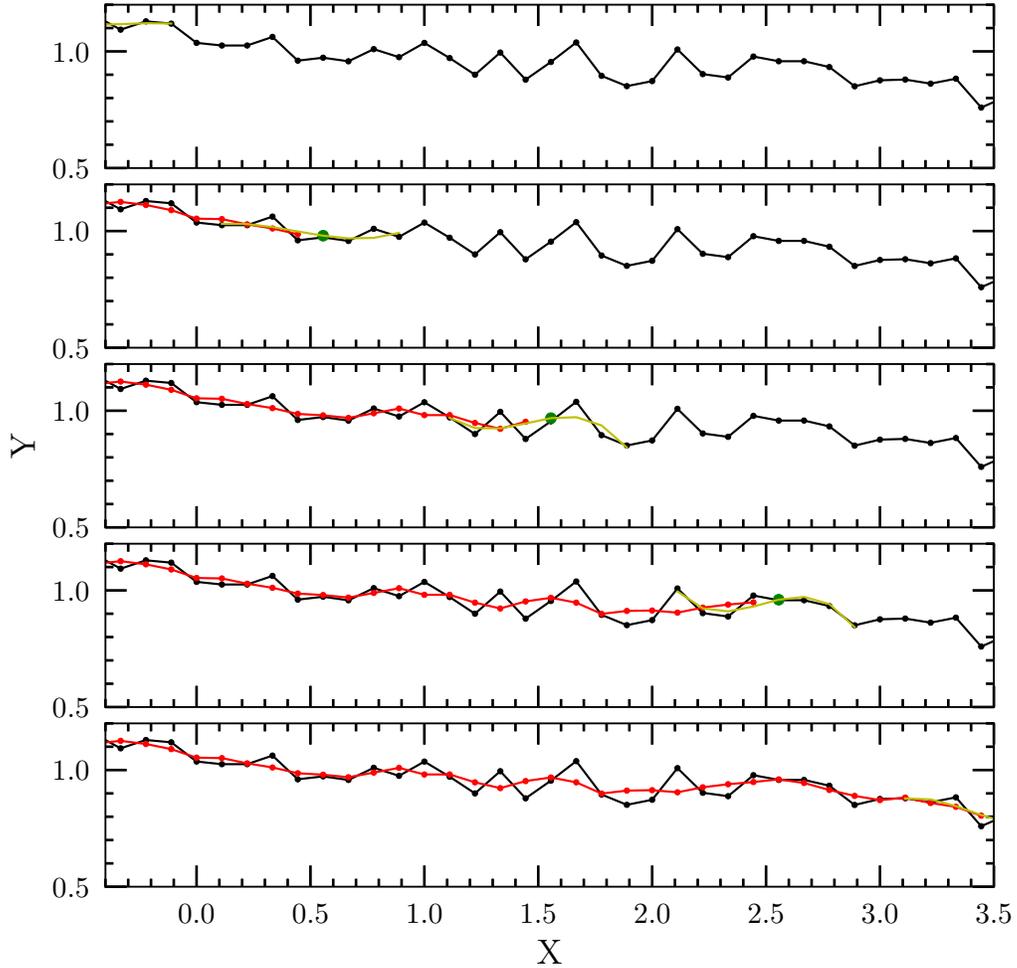
Le choix de la largeur appropriée peut être complexe mais est crucial pour le bon fonctionnement de l'algorithme. Si une fenêtre trop grande est prise, les détails du profil peuvent disparaître ou être atténués en étant confondus par des artéfacts par l'algorithme. Cela souligne une des faiblesses de l'algorithme qui est apparente lorsque la largeur moyenne des artéfacts est similaire au détail le plus étroit du profil de raie. Heureusement, lors de calcul de profil théorique par des simulations, il est toujours possible d'effectuer des ajustements quant au nombre de points décrivant le profil, limitant les situations où l'algorithme devient inutile ou même nuisible.

## D.2. Adaptations de l'algorithme aux profils théoriques

Lors de la production d'un profil de raie théorique, la résolution en fréquence dépend du temps de la simulation. Pour certains profils de raies, les détails du profil sont parfois très étroits, demandant un plus grand nombre de points de fréquence pour les décrire, ce qui est plus commun au coeur des raies. Il est alors nécessaire de produire une simulation pendant un assez grand temps afin d'obtenir une meilleure résolution en longueur d'onde (ou fréquence; voir l'annexe A) lorsque la raie est étroite.

De plus, puisque l'intensité des profils tend vers 0 à une distance infinie du coeur, le détail du profil est au centre et non dans les ailes. Ainsi, le profil est divisé en deux sections : le centre du profil ( $\sim 25 \text{ \AA}$  autour du coeur) et les ailes. Chacune de ces sections a une fenêtre de grandeur distincte afin d'effectuer un meilleur lissage. La fenêtre des ailes du profil doit être plus grande que celle du coeur puisque le bruit statistique est plus important, dû au nombre plus faible de collisions produisant des énergies aussi loin du coeur (voir la distribution de champs électriques de la section 4.1.2).

Pour produire les fichiers décrivant les profils de raies, nous utilisons une grille de longueurs d'onde similaire à celle de Beauchamp et al. (1997). Ceci permet de réduire l'espace



**Fig. D.1.** Illustration de la technique de lissage de Savitzky-Golay pour des données arbitraires (noir). La courbe rouge représente les données après le lissage et le point vert représente le nouveau point étant en cours de correction. La courbe jaune est l'ajustement du polynôme qui permet de déterminer le point vert.

mémoire nécessaire pour enregistrer l'ensemble des profils en plus d'être plus simple à travailler. Puisque les points de la grille ne sont pas nécessairement identiques à ceux du profil produit par la simulation, une interpolation du profil est effectuée autour du point de la grille afin d'inclure la bonne valeur. Une bonne grille de longueurs d'onde permet de conserver les détails du profil en plus d'effectuer un dernier niveau, plus grossier, de lissage du profil.



