



Méthodologie des interactions laser-atomes : application à l'ionisation simple quasi-résonante de l'hélium à trois photons

Dissertation présentée en vue de l'obtention du grade de docteur en Sciences par

Hippolyte NYENGERI

Composition du jury :

Président : D. Favart, U.C.L.
Promoteur : B. Piraux, U.C.L.

Examineur :

- J.-P. Antoine, U.C.L.
- X. Urbain, U.C.L.
- H. Bachau, Université Bordeaux I
- S. Guerin, Université de Bourgogne

30 avril 2009

Dédicace

A mon père, à ma mère,
A mon épouse,
A mes frères et soeurs,
A tous ceux qui me sont chers, . . .

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier le directeur de cette thèse, le Professeur Bernard Piraux. Ses précieux conseils et son enthousiasme constant ont permis la réalisation de ce travail, je lui en suis très reconnaissant.

Mes remerciements vont également au Professeur Stephane Guerin de l'Université de Bourgogne pour tous les conseils et les programmes qu'il a bien voulu m'envoyer, pour l'hospitalité dont il a fait preuve envers moi lors du séjour que j'ai effectué dans son groupe, et aussi pour m'avoir fait l'honneur de participer au jury de soutenance.

Je remercie tous ceux sans qui cette thèse ne serait pas ce qu'elle est : aussi bien par les discussions que j'ai eu le plaisir d'avoir avec eux, leurs suggestions ou contributions. Je pense ici en particulier à M. Javier Madroñero et au Professeur Hans-Rudolph Jauslin de l'Université de Bourgogne.

Je témoigne ma reconnaissance à tous les membres du jury de ma thèse. Leurs commentaires et leurs questions m'ont permis d'améliorer ma rédaction et m'ont donné les nouvelles pistes de réflexion.

Merci au membre de l'unité PAMO pour leur accueil.

Pour leur assistance matérielle qui m'a permis de faire cette thèse dans de bonnes conditions, je remercie chaudement la CUD qui a financé la presque totalité de mes études doctorales, et l'Université de Bourgogne qui a financé mon séjour à l'Institut Carnot de Bourgogne.

Ces années de thèse ont constitué un cheminement difficile qu'il m'eût été impossible de parcourir seul. Je voudrais commencer par Ancile qui m'a encouragé et supporté, ou plus exactement a supporté mes absences tout au long de ce travail. Je la remercie de tout mon coeur pour cela et pour tout le reste. Merci pour le soutien inconditionnel de tous les doctorants et docteurs que j'ai côtoyé durant cette thèse.

Merci enfin à toute ma famille de m'avoir supporté et aidé.

Table des matières

Introduction	1
1 Méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps	5
1.1 Hamiltonian d'un atome à N électrons	6
1.2 Equation de Schrödinger dépendante du temps	9
1.3 Approche spectrale pour la résolution de l'ESDT . . .	10
1.3.1 Le problème de Sturm-Liouville : les fonctions sturmiennes	12
1.3.1.1 Définition	12
1.3.1.2 Propriétés des solutions d'un problème de Sturm-Liouville	13
1.3.2 Les fonctions sturmiennes coulombiennes . . .	14
1.3.3 Les fonctions sturmiennes coulombiennes complexes	17
1.3.4 Fonctions sturmiennes pour le potentiel de Pöschl-Teller	19
1.3.5 Formulation matricielle de l'équation de Schrödinger	22
1.4 La méthode de dilatation complexe du Hamiltonien . .	28
1.5 Résolution numérique de l'ESDT par une méthode explicite	48
1.5.1 Changement de base	48
1.5.2 Caractère "raide" du problème	50
1.5.3 Les méthodes de Runge-Kutta	50
1.5.4 La méthode de Fatunla	51

1.6	La méthode de Floquet	65
2	Couplage d'un état lié à un continuum : Le modèle de Friedrichs-Fano tourné	75
2.1	Introduction	75
2.2	Le modèle de Friedrichs-Fano tourné	76
2.3	Calcul des résonances	79
2.4	Fonctions propres du nouveau continuum	82
2.5	Application au potentiel de Pöschl-Teller habillé	84
2.5.1	Les fonctions propres impaires du continuum	86
2.5.2	Calcul des éléments de la matrice de couplage non tournée	88
2.5.3	Calcul des résonances	100
3	Ionisation simple de l'atome d'hélium à trois photons	123
3.1	Introduction	123
3.2	Brève description de l'expérience.	124
3.3	Résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps.	124
3.3.1	Fonction d'onde du système	126
3.3.2	Développement de la partie spatiale de la fonction d'onde	128
3.3.3	Formulation matricielle de l'équation de Schrödinger.	130
3.3.4	Résolution numérique de l'équation de Schrödinger.	131
3.3.5	Energies des états liés de l'atome d'hélium	132
3.4	Résolution de l'ESDT par la méthode de Floquet.	134
3.5	L'algorithme de Lanczos	141
3.6	Stockage des matrices	143
3.7	Résultats	146
3.7.1	Spectre du hamiltonien de Floquet tourné	146
3.7.2	Stabilité de l'algorithme de Lanczos	152
	Conclusion	153
A	Résolution analytique de l'équation $\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}-U_0\operatorname{sech}^2(\alpha x)\right]\psi=E\psi$.	157
A.1	Première méthode.	157
A.2	Deuxième méthode : les fonctions sturmiennes	161

B	Calcul d'éléments matriciels pour le modèle atomique	165
B.1	La matrice de recouvrement S	165
B.2	Matrice associée au potentiel de Pöschl-Teller	166
B.3	Matrice associée à l'opérateur énergie cinétique E_c . .	167
B.4	Matrice de l'opérateur dipolaire dans la jauge vitesse .	167
B.5	Matrice du hamiltonien d'interaction dans la jauge longueur	169
C	Les approximants de Padé	177
C.1	Définition des approximants de Padé	177
C.2	Propriétés des approximants de Padé	180
D	Algorithme epsilon de Wynn	183
D.1	Introduction : Convergence des suites	183
D.2	La transformation de Shanks	184
D.3	Transformation de Shanks et approximants de Padé . .	185
D.4	L'algorithme epsilon	185
D.5	L'algorithme epsilon et la transformation de Shanks . .	187
	Bibliographie	189

Introduction générale

Pour étudier les interactions laser-atomes, on a besoin de résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps (ESDT) qui décrit la dynamique du système atome + champ. La résolution de cette équation n'est généralement pas réalisable analytiquement. Elle requiert l'introduction d'approximations et est effectuée à l'aide des méthodes numériques. Il importe de signaler que si l'intensité du champ devient importante et/ou si le système atomique devient complexe, les approches purement numériques qui se fondent sur l'utilisation de grilles (différences finies, éléments finis) deviennent très lourdes numériquement, voire même impossibles à implémenter, à cause des limitations imposées par l'outil informatique. D'où la nécessité de développer des méthodes adaptées à ce genre de problème.

L'objectif primordial de cette thèse est d'étudier différentes méthodes de propagation dans le temps de la fonction d'onde du système total. Les méthodes que nous présentons ici se fondent toutes sur une approximation spectrale de la structure atomique qui consiste à développer les fonctions radiales sur les bases finies de fonctions de carré sommable. Les méthodes spectrales sont des méthodes globales par opposition aux méthodes de grilles qui elles sont locales. Elles présentent l'avantage de converger, en général, très rapidement (exponentiellement) vers la solution exacte, et ce en fonction de la taille de la base.

Sur le plan numérique, la taille de la base pose souvent un problème en rapport avec la quantité de mémoire exigée. En effet, la matrice associée à l'opérateur hamiltonien est en général pleine, sauf dans le cas particulier de l'atome d'hydrogène, ce qui forge l'introduction des méthodes sophistiquées pour résoudre l'ESDT. Une de ces mé-

thodes est la *rotation complexe du hamiltonien*[Rei82, Moi98]. Nous montrons que le calcul des observables, notamment celui du spectre en énergie des électrons émis, peut être effectué même si les énergies des états du continuum deviennent complexes suite au caractère non hermitique du hamiltonien tourné. Nous montrons également que la dilatation complexe du hamiltonien associé au *modèle de Friedrichs-Fano*[Frie48, Fan61, Fuj08, Koch97] tourné permet de calculer les résonances de manière simple.

Il importe de signaler que la propagation dans le temps de la fonction d'onde du système peut difficilement se faire dans la base des fonctions de carré sommable car le problème devient “raide”, c’est-à-dire que le pas d’intégration sur le temps diminue beaucoup quand on augmente la taille de la base. Pour résoudre ce problème de “raideur”, on peut faire appel à des méthodes implicites, ce qui nécessite la résolution des gros systèmes d’équations algébriques à chaque pas d’intégration sur le temps. On peut aussi réduire la “raideur” du problème en travaillant dans la base atomique et dans la représentation d’interaction. Mais ce procédé exige la diagonalisation de grosses matrices.

Une autre manière d’éviter le problème de “raideur” tout en travaillant dans la base des fonctions de carré sommable est l’utilisation de la *méthode de Fatunla*[Fatu80]. Celle-ci consiste à postuler au préalable une forme particulière de la solution. Elle est explicite et très rapide dans la mesure où elle n’exige que des produits matrice vecteur. Le prix à payer est que l’on est obligé de résoudre des systèmes d’équations quadratiques une fois avant la propagation, et en général plusieurs fois pendant la propagation.

Pour tester ces méthodes, nous avons traité le cas de l’atome d’hydrogène et celui du modèle de Pöschl-Teller[Flu71, Lam80, Mor53] en une dimension. Dans les deux cas, il est facile de trouver des fonctions de carré sommable qui conviennent à la physique du problème, les fonctions sturmiennes coulombiennes pour l’hydrogène, et les fonctions sturmiennes associées au potentiel de Pöschl-Teller pour le modèle atomique considéré.

Outre les méthodes de propagation dans le temps, on peut, lorsque l’enveloppe du champ laser ne varie pas, appliquer la *méthode de Floquet*[Pot92, Chu89, Dio76, Bay79] où est impliquée la dilatation complexe du hamiltonien. Nous appliquons cette méthode à notre modèle atomique. Nous l’appliquons aussi à l’ionisation simple de l’atome d’hélium à trois photons via les états de Rydberg dans le but d’élu-

cider les résultats de l'expérience qui a été réalisée à l'UCL sur l'ionisation double de l'ion He^- . Plus précisément, nous cherchons une explication au comportement inattendu de certaines résonances qu'on a observé dans le signal de double photoionisation en fonction de la fréquence du laser, à savoir le déplacement Stark, en sens contraires, des transitions multiphotoniques issues des états $1s2s\ ^3S$ et $1s2p\ ^3P$.

La thèse se décompose en trois chapitres suivis d'une conclusion. Le premier chapitre donne une présentation générale des différentes méthodes de résolution de l'ESDT, toutes basées sur le développement de la fonction d'onde sur une base finie de fonctions de carré sommable. Ces méthodes sont testées sur l'hydrogène et/ou le modèle atomique de Pöschl-Teller. Le second chapitre traite du couplage d'un état lié à un continuum d'états, et ce en vue du calcul des résonances dans le cadre du modèle de Friedrichs-Fano tourné. Dans le dernier chapitre, nous appliquons les méthodes présentées dans le premier chapitre à l'ionisation simple de l'hélium à trois photons.

Chapitre 1

Méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps

Dans ce chapitre, nous introduisons un certain nombre de méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps (ESDT) pour un atome en interaction avec un champ électrique oscillant. Il est bien établi qu'une telle équation n'admet en général pas de solution analytique, même dans le cas stationnaire (en l'absence du champ). On fait, par conséquent, appel à des méthodes numériques lorsqu'on a affaire à un problème de ce type.

Pour illustrer et tester la mise en oeuvre de ces méthodes, nous considérons le cas de l'atome d'hydrogène et d'un modèle simple dans lequel un électron se meut dans un potentiel de Pöschl-Teller. Dans ces deux cas, une solution analytique existe pour les états stationnaires.

Le traitement théorique du système (atome + champ) exige avant tout la connaissance de son hamiltonien, égal à la somme du hamiltonien atomique et de celui d'interaction. Il nous semble donc important de consacrer la première section du présent chapitre au calcul du hamiltonien d'un atome possédant un certain nombre N d'électrons. Le calcul du hamiltonien d'interaction figure dans la section 1.2. Nous nous plaçons dans le cadre de l'approximation dipolaire.

Dans la section 1.3, nous introduisons, puis testons sur l'atome d'hydrogène en interaction avec un champ laser intense, une approche spectrale pour la résolution de l'ESDT. Cette approche consiste à développer la partie radiale de la fonction d'onde totale sur une base de fonctions

de carré sommable appropriées en vue d'une formulation matricielle de l'équation de Schrödinger. C'est dans cette section que nous définissons les fonctions sturmiennes pour l'atome d'hydrogène et celles associées au potentiel de Pöschl-Teller. Les fonctions sturmiennes présentent un intérêt particulier dans la mesure où elles forment une base purement discrète et sont solutions d'une équation aux valeurs propres semblable à l'équation de Schrödinger indépendante du temps du système à étudier. Dans la section 1.4, nous introduisons la méthode de rotation complexe des coordonnées que nous appliquons à notre modèle atomique. Dans la section 1.5, nous présentons deux types de méthodes numériques explicites pour la résolution de l'ESDT sous sa forme matricielle. Il s'agit des méthodes de Runge-Kutta bien connues et de la méthode de Fatunla [Fatu80] qui est une méthode particulièrement bien adaptée pour des systèmes dont la solution oscille rapidement. Cette méthode n'a jamais été testée dans le cas de l'ESDT alors qu'elle se fonde sur une expression formelle de la solution qui correspond bien à celle de l'ESDT. Nous testons ces méthodes sur le modèle atomique susmentionné. Notons que l'ESDT pour l'atome d'hydrogène a été résolue en utilisant la méthode de Runge-Kutta dans la base atomique et en représentation d'interaction après une dilatation complexe du Hamiltonien. Pour terminer ce chapitre, nous considérons, dans la section 1.6, la méthode de Floquet, combinée avec celle de rotation complexe des coordonnées. Nous appliquons cette méthode à notre modèle atomique, en présence d'un champ laser, pour illustrer l'effet de la rotation complexe des coordonnées sur le spectre du hamiltonien de Floquet. Nous montrons que cette méthode permet de suivre en fonction de l'intensité du champ laser le mouvement des pôles dans le plan complexe des énergies, pôles correspondant à des états induits par le champ laser. Ces états ont été mis en évidence pour la première fois par Piraux et al [Pir88]. Cette méthode est en outre utilisée dans le troisième chapitre pour étudier l'ionisation simple quasi-résonante de l'hélium à trois photons.

1.1 Hamiltonian d'un atome à N électrons

Considérons un atome constitué d'un noyau de masse M contenant Z protons, et de N électrons de masse m . Désignons par $\vec{R}_0$ le vecteur position du noyau par rapport à une origine fixe O . Les N électrons sont repérés par rapport à O par les vecteurs position $\vec{R}_i$, $i = 1, 2, \dots, N$. Le traitement théorique d'un tel système exige avant tout la connais-

sance de son opérateur hamiltonien. Dans une description quantique non relativiste, en l'absence de champ extérieur, le hamiltonien total du système est donné par :

$$H_{tot} = -\frac{\hbar^2}{2M} \vec{\nabla}_{R_0}^2 + \sum_{j=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_j} \vec{\nabla}_{R_j}^2 \right) + V, \quad (1.1)$$

où l'énergie potentielle V est la somme de toutes les interactions coulombiennes entre les $(N + 1)$ particules chargées du système.

Introduisons, pour le moment, la coordonnée $\vec{R}$ du centre de masse de l'atome par rapport à l'origine fixe O , et les coordonnées relatives $\vec{r}_j = \vec{R}_j - \vec{R}_0$ ($j = 1, 2, \dots, N$) des N électrons par rapport au noyau. En passant des coordonnées $(\vec{R}_0, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N)$ aux coordonnées $(\vec{R}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$, on transforme l'expression (1.1) du hamiltonien total du système en [Bet57] :

$$\begin{aligned} H_{tot} = & -\frac{\hbar^2}{2(M + Nm)} \vec{\nabla}_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{j=1}^N \vec{\nabla}_{r_j}^2 - \frac{\hbar^2}{M} \sum_{i>j} \vec{\nabla}_{r_i} \cdot \vec{\nabla}_{r_j} \\ & + V(r_1, r_2, \dots, r_N), \end{aligned} \quad (1.2)$$

où $\mu = \frac{mM}{m+M}$ est la masse réduite de l'électron par rapport au noyau. Le premier terme du Hamiltonien (1.2) est associé à l'énergie cinétique du centre de masse, le second terme à l'énergie cinétique totale des N électrons, la masse commune de chacun d'eux étant remplacée par la masse réduite μ à cause du mouvement des noyaux. Le troisième terme, présent uniquement si $N \geq 2$, est appelé *terme de polarisation de masse*.

En coordonnées relatives, l'opérateur énergie potentielle associé aux interactions coulombiennes s'écrit :

$$V(r_1, r_2, \dots, r_N) = -\sum_{j=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_j} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}, \quad (1.3)$$

où ϵ_0 désigne la permittivité du vide et $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$. Le premier terme de l'équation (1.3) représente l'interaction coulombienne totale entre le noyau et les N électrons. Il caractérise la force d'attraction exercée par la charge Ze du noyau sur les électrons. Le deuxième terme représente l'interaction électron-électron.

L'équation de Schrödinger stationnaire pour la partie spatiale de la fonction d'onde correspondant aux $(N + 1)$ particules du système est

$$H_{tot}\Psi_{tot}(\vec{R}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = E_{tot}\Psi_{tot}(\vec{R}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (1.4)$$

où E_{tot} désigne l'énergie totale. Comme les coordonnées relatives $(\vec{R}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ et la coordonnée du centre de masse $\vec{R}$ ne sont pas couplées dans le hamiltonien (1.2), la solution de l'équation de Schrödinger (1.4) peut être écrite sous la forme

$$\Psi_{tot}(\vec{R}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = F(\vec{R})\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) , \quad (1.5)$$

de manière à ce que les fonctions $F(\vec{R})$ et $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ vérifient les équations

$$-\frac{\hbar^2}{2(M + Nm)}\vec{\nabla}_R^2 F(\vec{R}) = E_{CM}F(\vec{R}) \quad (1.6)$$

et

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{j=1}^N \vec{\nabla}_{r_j}^2 - \frac{\hbar^2}{M} \sum_{i \geq j} \vec{\nabla}_{r_i} \cdot \vec{\nabla}_{r_j} + V(r_1, \dots, r_N) \right) \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (1.7)$$

respectivement. Il apparaît clairement, à partir de l'équation (1.6), que le centre de masse du système se déplace comme une particule libre ayant une masse égale à la masse totale $(M + Nm)$ et l'énergie cinétique E_{CM} . Dans la mesure où la masse de l'électron est beaucoup plus petite que celle du proton ($m \ll M$), nous introduisons l'approximation du noyau de masse infinie. Cette approximation transforme l'équation (1.7) en

$$H_0\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (1.8)$$

avec

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \vec{\nabla}_{r_j}^2 + V(r_1, \dots, r_N) \quad (1.9)$$

L'une des conséquences de cette approximation est donc l'élimination du terme de polarisation de masse. L'autre conséquence est que la masse réduite μ devient la masse de l'électron m .

1.2 Equation de Schrödinger dépendante du temps

Nous venons de voir que le mouvement du noyau peut être séparé de celui des électrons par rapport au noyau en l'absence du champ extérieur. Lorsque le système atomique interagit avec un champ électromagnétique, ce dernier couple le mouvement du noyau et les mouvements relatifs des électrons. Ce couplage rend impossible la séparation de ces mouvements [MI82]. L'équation de Schrödinger dépendante du temps est pour cette raison difficile à résoudre sans faire des approximations. Pour éviter cette difficulté, nous faisons appel à l'approximation du noyau infiniment lourd. Nous supposons que le noyau est tellement lourd (par rapport à l'électron) qu'il peut être considéré comme fixe et, par conséquent, pris comme origine du système de coordonnées. Dans le cadre de cette approximation, et en l'absence du champ extérieur, l'équation de Schrödinger dépendante du temps pour un atome à N électrons est donnée par :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) = H_0 \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) \quad (1.10)$$

en représentation de Schrödinger. H_0 est le hamiltonien de l'atome isolé (équation (1.9)). Lorsque l'atome interagit avec un champ électromagnétique extérieur, l'ESDT devient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) = H \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t), \quad H = H_0 + H_G(t) \quad (1.11)$$

où $H_G(t)$ est le hamiltonien d'interaction entre le champ électromagnétique et l'atome. Nous nous plaçons dans le cadre de l'approximation dipolaire (approximation des grandes longueurs d'onde). Dans les jauges longueur ($G \equiv L$) et vitesse ($G \equiv V$), le hamiltonien d'interaction s'écrit :

$$\begin{aligned} H_L(t) &= \vec{E}(t) \cdot (\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \dots + \vec{r}_N) , \quad H_V(t) \\ &= -i\vec{A}(t) \cdot (\vec{\nabla}_{r_1} + \vec{\nabla}_{r_2} + \dots + \vec{\nabla}_{r_N}) \end{aligned} \quad (1.12)$$

dans le système d'unités atomiques.

Nous définissons le champ électrique par

$$\vec{E}(t) = -\frac{\partial}{c \partial t} \vec{A}(t) \quad (1.13)$$

où c est la vitesse de la lumière dans le vide et $\vec{A}(t)$ le potentiel vecteur défini par la relation

$$\vec{A}(t) = A_0 f(t) \sin(\omega t + \phi) \vec{e}_z , \quad (1.14)$$

avec $\vec{e}_z$ un vecteur unitaire le long de la direction de polarisation du champ électrique, direction qui coïncide avec l'axe des z dans notre cas. Dans le cas d'un problème unidimensionnel (le long de l'axe des x par exemple), on fait coïncider la direction de polarisation du champ avec l'axe des x . A_0 représente l'amplitude du potentiel vecteur et $f(t)$ son enveloppe.

1.3 Approche spectrale pour la résolution de l'ESDT

Il est en général très difficile, voire même impossible, de résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps (1.11) analytiquement, même dans le cas où $H_G(t) = 0$. On fait pour cela appel à des méthodes numériques, entre autres les méthodes spectrales et celle des grilles (différences finies). Pour introduire les méthodes spectrales, nous considérons l'équation aux valeurs propres (1.8). Cette dernière peut être écrite sous la forme suivante :

$$(H_0 - E) \Psi(\vec{x}) = 0 , \quad (1.15)$$

où $\vec{x}$ représente l'ensemble des coordonnées relatives des électrons par rapport au noyau. Toutes les méthodes spectrales sont basées sur le développement de la solution $\Psi(\vec{x})$ en série tronquée de fonctions de base

de carré sommable dans un espace de Hilbert, en imposant qu'une quantité comme le résidu soit nulle dans un sens donné. Plus précisément, nous écrivons

$$\Psi_N(\vec{x}) = \sum_{\nu=1}^N a_\nu \Phi_\nu(\vec{x}) . \quad (1.16)$$

N désigne le nombre de fonctions de base $\Phi_\nu(\vec{x})$. Les N coefficients a_ν du développement (1.16) sont calculés en annulant le résidu R_N , défini par [Fin72]

$$R_N(\vec{x}) = (H_0 - E) \Psi_N(\vec{x}) , \quad (1.17)$$

dans le sens suivant :

$$\langle R_N , \varphi_\nu \rangle = \int R_N(\vec{x}) \varphi_\nu(\vec{x}) w(\vec{x}) d\vec{x} = 0 , \quad \nu = 1, \dots, N . \quad (1.18)$$

Les $\varphi_\nu(\vec{x})$ représentent des fonctions test, tandis que $w(\vec{x})$ est une fonction de poids dépendant du choix des fonctions de base. Le choix des fonctions test et la fonction de poids définissent la méthode.

Si les fonctions test coïncident avec les fonctions de base, nous obtenons la **méthode de Galerkin**. Pour cette méthode, le résidu R_N est nul en moyenne. La méthode de Galerkin ne s'applique que lorsque les fonctions de base $\Phi_\nu(\vec{x}) \equiv \varphi_\nu(\vec{x})$ satisfont les conditions aux frontières qui peuvent être de type Dirichlet, Neumann ou Cauchy-Robin. Si les fonctions de base ne satisfont pas les conditions aux frontières, nous avons la **méthode Tau** [Col76] introduite par Lanczos. Nous verrons, dans la section 1.3.2, que lorsque les fonctions de base sont les fonctions sturmiennes coulombiennes (cas de l'atome d'hydrogène par exemple), il est utile de travailler avec une base complexe pour avoir des fonctions ayant un comportement asymptotique adéquat, compte tenu des conditions aux frontières.

Lorsque les fonctions test sont données par le produit $\prod_i \delta(\vec{x}_i - \vec{x})$, nous obtenons la **méthode de collocation** dans laquelle on annule les résidu R_N aux points de collocation ($R_N(\vec{x}_i) = 0$, $i = 1, \dots, N$). La méthode de collocation ressemble à la méthode des grilles aux différences finies (finite difference grid method), sauf que le choix des points de collocation n'est pas arbitraire. Il est lié aux fonctions test. Dans la plupart des cas, les N points de collocation sont les abscisses de la quadrature de Gauss. Le fait que les points de collocation coïncident avec

les abscisses de la quadrature de Gauss associées aux fonctions de base assure en général la convergence spectrale (exponentielle) du développement (1.26) vers la solution exacte, et ce en fonction du nombre de fonctions de base.

Il importe de signaler que pour résoudre l'ESDT par une méthode spectrale, on procède de la même façon que pour l'équation de Schrödinger indépendante du temps, sauf que les coefficients intervenant dans le développement de la solution en série dépendent du temps. Plus précisément, nous remplaçons l'équation (1.16) par

$$\Psi_N(\vec{x}, t) = \sum_{\nu=1}^N a_{\nu}(t) \Phi_{\nu}(\vec{x}). \quad (1.19)$$

Les méthodes spectrales reposent donc sur le choix, dicté par la physique du problème, d'un ensemble complet et discret de fonctions de base. En général, il s'agit de polynômes orthogonaux ou, plus généralement, de fonctions qui sont solutions d'un problème aux valeurs propres de Sturm-Liouville.

1.3.1 Le problème de Sturm-Liouville : les fonctions sturmiennes

1.3.1.1 Définition

En mathématique, un grand nombre de fonctions orthogonales (telles que les polynômes de Legendre, les polynômes de Legendre associés, les fonctions de Bessel, ...) proviennent des solutions d'une équation différentielle du second ordre de la forme suivante :

$$f(x) \frac{d^2 u}{dx^2} + g(x) \frac{du}{dx} + [h(x) + \lambda] u(x) = 0 \quad (1.20)$$

sur un intervalle (a , b), satisfaisant les conditions aux frontières

$$k_1 u(a) + k_2 u'(a) = 0 \quad (1.21)$$

et

$$l_1 u(b) + l_2 u'(b) = 0. \quad (1.22)$$

λ est un paramètre et k_1 , k_2 , l_1 et l_2 sont des constantes réelles données ; les couples (k_1, k_2) et (l_1, l_2) sont différents du couple $(0, 0)$.

L'expression (a, b) , lorsqu'elle se rapporte à un intervalle, désigne un intervalle ouvert, semi-ouvert ou fermé d'extrémités a et b , avec $a < b$.

En posant

$$\frac{g(x)}{f(x)} = \frac{1}{w(x)} \frac{dw}{dx}, \quad (1.23)$$

$$q(x) = \frac{h(x)}{f(x)} w(x) \quad (1.24)$$

et

$$p(x) = \frac{w(x)}{f(x)}, \quad (1.25)$$

on peut écrire l'équation (1.20) sous les formes suivantes :

$$\frac{d}{dx} \left[w(x) \frac{du}{dx} \right] + [q(x) + \lambda p(x)] u(x) = 0, \quad (1.26)$$

$$\mathbf{L}u + \lambda p(x)u = 0, \quad (1.27)$$

où $\mathbf{L}$ est l'opérateur différentiel défini par

$$\mathbf{L} = \frac{d}{dx} \left[w(x) \frac{d}{dx} \right] + q(x) \quad (1.28)$$

Une équation de la forme (1.26) est appelée *équation de Sturm-Liouville*. Si nous y ajoutons les conditions aux frontières (1.21) et (1.22), nous obtenons un *problème de Sturm-Liouville* [Cou53].

1.3.1.2 Propriétés des solutions d'un problème de Sturm-Liouville

La résolution d'un problème de Sturm-Liouville régulier conduit à une infinité de fonctions propres, $u_n(x)$, associées à des valeurs propres λ_n . On peut démontrer les deux théorèmes suivants :

Théorème 1.1 (Orthogonalité des fonctions propres) *Si les fonctions p , q , w et $\frac{dw}{dx}$ dans l'équation de Sturm-Liouville sont réelles et continues dans l'intervalle (a, b) , alors les fonctions propres $u_n(x)$ sont orthogonales sur cet intervalle par rapport à la fonction de poids $p(x)$. Autrement dit,*

$$\int_a^b u_n(x) u_m(x) p(x) dx = 0 \quad \text{si} \quad \lambda_n \neq \lambda_m \quad (1.29)$$

Théorème 1.2 *Si le problème de Sturm–Liouville satisfait aux conditions du théorème 1 et si $w(x)$ et $p(x)$ sont positifs dans l'intervalle (a, b) , alors :*

1. *les valeurs propres sont réelles et non dégénérées. Elles forment une suite infinie dénombrable, non bornée vers le haut, dont la distribution est*

$$0 < \lambda_0 < \lambda_1 < \lambda_3 < \lambda_4 < \dots$$

2. *la fonction propre $u_n(x)$ possède n zéros dans l'intervalle (a, b) .*
3. *l'ensemble $\{u_n(x) | a \leq x \leq b, n = 0, 2, 3, \dots\}$ des fonctions propres forme une base orthogonale complète pour les fonctions $f(x) \in L^2((a, b), p(x) dx)$ continues par morceaux. Plus précisément, on a :*

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x), \quad (1.30)$$

avec

$$c_n = \frac{\int_a^b f(x) u_n(x) p(x) dx}{\int_a^b u_n(x) u_n(x) p(x) dx}, \quad (1.31)$$

si la fonction f est continue en x .

1.3.2 Les fonctions sturmiennes coulombiennes

Les fonctions sturmiennes coulombiennes $S_{n,l}^{\kappa}(r)$ forment une base particulièrement bien adaptée au problème de l'atome d'hydrogène en présence d'un champ extérieur. Dans la littérature, on rencontre plusieurs définitions de fonctions sturmiennes coulombiennes. Elles diffèrent soit par le comportement à l'origine (en r^l ou r^{l+1}), soit par la normalisation choisie. Nous utiliserons dans ce qui suit la même définition que Pont et Shakeshaft [Pon91].

Les fonctions Sturmiennes $S_{n,l}^{\kappa}(r)$ sont les solutions d'un problème aux valeurs propres de Sturm–Liouville de type :

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{\alpha}{r} + \frac{\kappa^2}{2} \right] S_{n,l}^\kappa(r) = 0, \quad (1.32)$$

avec les conditions limites suivantes :

$$S_{n,l}^\kappa(0) = 0 \quad , \quad S_{n,l}^\kappa(\infty) = 0 \quad (1.33)$$

κ est pour l'instant un paramètre réel positif et arbitraire, tandis que n et l sont des entiers positifs tels que $n > l$, et α est une valeur propre qui vaut κn . On remarque assez facilement que l'équation (1.32) décrit le mouvement radial d'un électron d'énergie $E = -\frac{\kappa^2}{2} = -\frac{\alpha^2}{2n^2}$ dans le champ d'un noyau de charge α .

L'équation (1.32) peut être réécrite sous la forme suivante :

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{\alpha}{r} + \frac{\kappa^2}{2} \right] \frac{S_{n,l}^\kappa(r)}{r} = 0. \quad (1.34)$$

Nous allons comparer cette équation avec l'équation aux valeurs propres définissant les fonctions radiales $R_{E,l}(r)$ d'un atome d'hydrogène. Les fonctions $R_{E,l}(r)$ satisfont l'équation [Nou01]

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{r} - E \right] R_{E,l}(r) = 0 \quad (1.35)$$

dans le système d'unités atomiques. Dans cette dernière, le couplage (terme en $\frac{1}{r}$) est fixé et l'énergie E est valeur propre. Nous remarquons aussi que l'opérateur intervenant dans cette équation est auto-adjoint et non-borné ; le spectre est constitué de valeurs propres négatives d'expressions

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.36)$$

et de valeurs propres positives qui forment un continuum. Par contre, dans l'équation (1.34) définissant les sturmiennes, le terme qui par analogie avec (1.35) joue le rôle de l'énergie $\frac{\kappa^2}{2}$ est fixé, et le paramètre de couplage α devient la valeur propre. Compte tenu du théorème 1.2, le spectre associé à l'opérateur intervenant dans (1.34) est purement discret.

Les fonctions sturmiennes coulombiennes sont de carrés sommables et forment une base complète de l'espace de Hilbert $L^2([0, \infty[; dr)$. Le

développement de la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène exposé à un champ électrique extérieur, $\Psi(\vec{r}, t)$, sur la base $\{S_{n,l}^\kappa\}$, conduit par conséquent à une expression du type :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{n,l,m} a_{n,l,m}(t) \frac{S_{n,l}^\kappa}{r} Y_{l,m}(\hat{r}) \quad , \quad (1.37)$$

où les $Y_{l,m}$ sont des harmoniques sphériques. Dans cette expression, un facteur $\frac{1}{r}$ a été introduit pour que $\Psi(\vec{r}, t)$ ait un comportement à l'origine en r^l . Nous faisons intervenir une somme discrète sur les différents éléments de la base.

Si nous développons la même fonction $\Psi(\vec{r}, t)$ sur les états propres de l'atome d'hydrogène, nous obtenons :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{l,m} \left\{ \sum_n b_{n,l,m}(t) R_{n,l}(r) + \int_0^\infty b_{E,l}(t) R_{E,l}(r) dr \right\} Y_{l,m}(\hat{r}). \quad (1.38)$$

Cette expression contient une intégrale sur les fonctions du continuum qui est très difficile, voire impossible, à manipuler lorsque l'on souhaite résoudre numériquement l'équation de Schrödinger. L'utilisation des Sturmienne nous permet donc d'éviter ce problème en "discrétisant" le continuum.

Les fonctions sturmiennes $S_{n,l}^\kappa(r)$ satisfont la relation d'orthogonalité

$$\left\langle S_{n,l}^\kappa \left| \frac{1}{r} \right| S_{n',l}^\kappa \right\rangle \equiv \int_0^\infty S_{n,l}^\kappa(r) \frac{1}{r} S_{n',l}^\kappa(r) dr = 0 \text{ si } n \neq n'. \quad (1.39)$$

Nous choisissons de les normaliser de la manière suivante (Choix de Shakeshaft) :

$$\langle S_{n,l}^\kappa | S_{n,l}^\kappa \rangle = 1. \quad (1.40)$$

En résolvant l'équation différentielle (1.32) avec les conditions aux limites (1.33), on obtient :

$$S_{n,l}^\kappa(r) = N_{n,l}^\kappa r^{l+1} e^{-\kappa r} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa r) \quad (1.41)$$

$$= \tilde{N}_{n,l}^\kappa r^{l+1} e^{-\kappa r} {}_1F_1(-n+l+1; 2l+2; 2\kappa r) \quad , \quad (1.42)$$

où $L_{n-l-1}^{2l+1}(x)$ désigne un polynôme de Laguerre de degré $n-l-1$ et ${}_1F_1$ la fonction hypergéométrique confluyente (de Kummer) [Gra07]. Les

constantes $N_{n,l}^\kappa$ et $\tilde{N}_{n,l}^\kappa$ sont ajustées de façon que les fonctions $S_{n,l}^\kappa(r)$ vérifient la condition de normalisation (1.40) et la relation d'orthogonalité (1.39). Elles sont données par

$$N_{n,l}^\kappa = \sqrt{\frac{\kappa}{n}} (2\kappa)^{l+1} \left[\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (1.43)$$

et

$$\tilde{N}_{n,l}^\kappa = \sqrt{\frac{\kappa}{n}} (2\kappa)^{l+1} \frac{1}{(2l+1)!} \left[\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (1.44)$$

Intéressons-nous maintenant à quelques propriétés des fonctions sturmiennes $S_{n,l}^\kappa(r)$ en fonction des paramètres n et κ . Sur la figure 1.1, nous représentons les courbes de $S_{n,l}^\kappa(r)$ pour trois valeurs du paramètre non linéaire κ ; $n = 5$ et $l = 0$. Nous remarquons que la fonction Sturmienne s'étend beaucoup plus dans l'espace et diminue d'amplitude lorsque κ diminue. Par contre, le graphe de cette fonction est comprimé lorsque κ augmente. En conséquence, il faut des sturmiennes de paramètre κ petit pour reproduire une fonction spatialement étendue et un κ grand pour les fonctions oscillant rapidement.

La figure 1.2 montre le tracé des fonctions sturmiennes pour $\kappa = 0.5$, $l = 2$ et trois valeurs de n . A partir de cette figure, nous constatons que l'amplitude des sturmiennes diminue lorsque n croît. Par contre, le nombre de noeuds ainsi que l'extension spatiale de ces fonctions augmentent avec n . Ainsi, si nous voulons reproduire une fonction étendue ou qui oscille rapidement, nous devons utiliser des fonctions sturmiennes d'indice n élevé. Signalons, pour terminer ce paragraphe, que la période des oscillations augmente avec r pour les paramètres κ et n donnés.

1.3.3 Les fonctions sturmiennes coulombiennes complexes

Il est utile, dans certaines situations, de travailler avec les fonctions sturmiennes coulombiennes complexes que l'on obtient en remplaçant le κ des fonctions $S_{n,l}^\kappa$ par le paramètre complexe $\kappa e^{-i\theta}$, où θ est un nombre réel. Nous appelons ce nouveau paramètre κ_c . Les fonctions sturmiennes coulombiennes complexes sont donc définies par

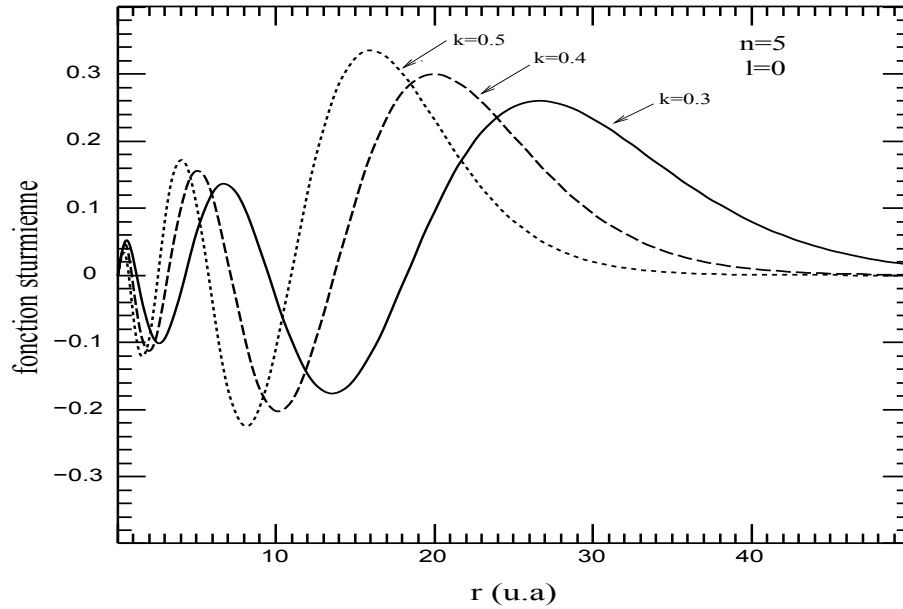


FIG. 1.1 – Comportement des sturmiennes en fonction du paramètre κ .

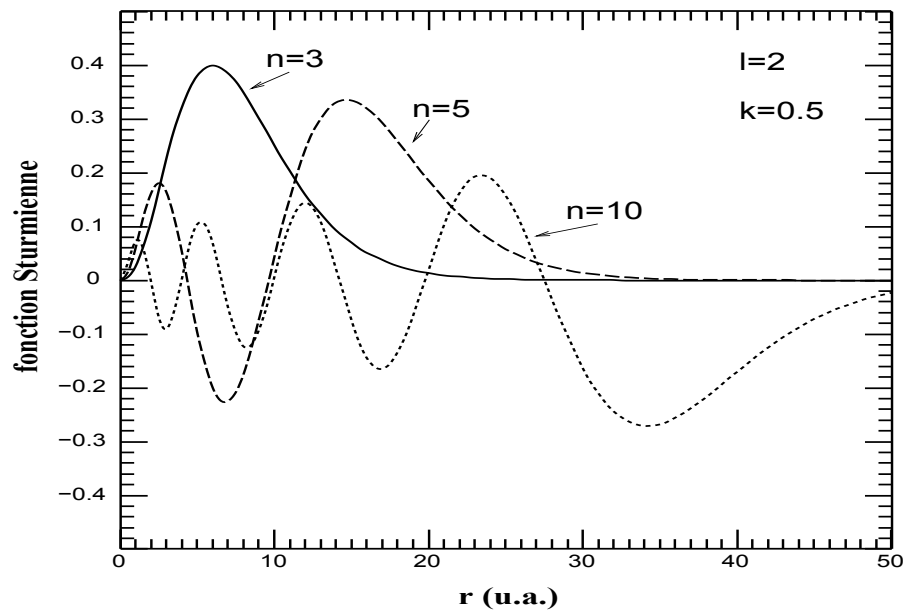


FIG. 1.2 – Comportement des sturmiennes en fonction du paramètre κ .

$$\begin{aligned}
S_{n,l}^{\kappa_c}(r) &= N_{n,l}^{\kappa_c} r^{l+1} e^{-\kappa_c r} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa_c r) \\
&= N_{n,l}^{\kappa_c} r^{l+1} e^{-(\kappa \cos(\theta))r} e^{i(\kappa \sin(\theta))r} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa_c r) \quad (1.45)
\end{aligned}$$

avec

$$N_{n,l}^{\kappa_c} = \sqrt{\frac{\kappa_c}{n}} (2\kappa_c)^{l+1} \left[\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (1.46)$$

et

$$\kappa_c = \kappa e^{-i\theta} \quad (1.47)$$

A partir de l'équation (1.45), nous obtenons la relation

$$\frac{S_{n,l}^{\kappa_c}(r)}{r} = F(r) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (1.48)$$

avec

$$F(r) = N_{n,l}^{\kappa_c} r^{l+1} e^{-(\kappa \cos(\theta))r} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa_c r), \quad k = \kappa \sin(\theta). \quad (1.49)$$

Les équations (1.48) et (1.49) montrent que si $\theta \in]0, \frac{\pi}{2}[$, la fonction $\frac{S_{n,l}^{\kappa_c}(r)}{r}$ représente une onde sphérique sortante qui décroît exponentiellement avec r . Nous reviendrons sur ce point dans la section 1.3.6.

Notons que le passage de κ à κ_c dans la définition des fonctions sturmiennes coulombiennes équivaut à une dilatation complexe du Hamiltonien du système d'un angle θ ($r \rightarrow r e^{i\theta}$) (voir section 1.4).

1.3.4 Fonctions sturmiennes pour le potentiel de Pöschl-Teller

Nous considérons un modèle atomique simple : un électron dans un puits de potentiel unidimensionnel,

$$U(x) = -\frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)}, \quad (1.50)$$

appelé potentiel de *Pöschl-Teller*¹ [Flu71, Lam80, Mor53] avec $U_0 \in \mathbb{R}_0^+$, $\alpha \in \mathbb{R}_0^+$ et $-\infty < x < +\infty$.

¹On trouve, dans la littérature [Flu71, Ant01] une autre définition du potentiel de Pöschl-Teller, à savoir

L'équation de Schrödinger dépendante du temps est :

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi}{dx^2} - U_0 \operatorname{sech}^2(\alpha x) \cdot \psi = E \psi \quad (1.51)$$

dans le système d'unités atomique. La fonction d'onde $\psi(x)$, solution de cette équation, peut être mise sous la forme suivante (annexe A) :

$$\psi(x) = A \operatorname{sech}^\beta(\alpha x) \cdot {}_2F_1\left(\frac{1}{2} + \beta + \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}}, \frac{1}{2} + \beta - \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}}; 1 + \beta; u(x)\right) \quad (1.52)$$

avec

$$\beta^2 = -\frac{2E}{\alpha^2}; \quad u(x) = \frac{1}{2} (1 - \tanh(\alpha x)) = \frac{e^{-\alpha x}}{e^{\alpha x} + e^{-\alpha x}} \quad (1.53)$$

et A une constante de normalisation. Cette fonction d'onde est de carré sommable si et seulement si

$$\beta = \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} - n; \quad n \in \mathbb{N} \text{ et } n < \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} \quad (1.54)$$

Par conséquent, le spectre de l'opérateur $-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - U_0 \operatorname{sech}^2(\alpha x)$ dans l'équation de Schrödinger (1.51) est constitué de valeurs propres négatives d'expression (voir annexe A)

$$E_n = -\frac{\alpha^2}{2} \left(n + \frac{1}{2}\right) - \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}}^2; \quad n = 0, 1, 2, \dots; \quad n < \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} \quad (1.55)$$

et de valeurs propres positives qui forment le continuum.

Dans l'hypothèse où

$$\frac{2U_0}{\alpha^2} = l(l+1) \quad \text{et} \quad \frac{-2E}{\alpha^2} = m^2 \quad (1.56)$$

avec $l \in \mathbb{N}$ et $m \in \mathbb{N}$, on montre (annexe A) que l'équation de Schrödinger (1.51) devient

$$U(x) = \frac{1}{2} U_0 \left(\frac{\lambda(\lambda-1)}{\cos^2 \alpha x} + \frac{\kappa(\kappa-1)}{\sin^2 \alpha x} \right); \quad \lambda > 1, \quad \kappa > 1, \quad U_0 > 0 \text{ et } 0 \leq x \leq \frac{\pi}{2\alpha}.$$

$$\left[(1-s^2)\psi'(s)\right]' + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-s^2}\right]\psi(s) = 0 \quad (1.57)$$

avec $s = \tanh(\alpha x)$. Cette équation a la forme de l'équation différentielle de Legendre associée, qui est une équation de Sturm-Liouville. Ses solutions peuvent donc être écrites sous la forme

$$\psi_l^m(x) = N_{lm} P_l^m(\tanh(\alpha x)) \quad (1.58)$$

où

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{\alpha m(l-m)!}{(l+m)!}} \quad (1.59)$$

est une constante de normalisation. De plus, pour $m > 0$, on a $\psi_l^m(-\infty) = \psi_l^m(+\infty) = 0$. Nous pouvons donc dire que les fonctions propres $\psi_l^m(x)$ sont des fonctions Sturmiennes associées au problème de Sturm-Liouville

$$\begin{cases} \left[(1-s^2)\psi'(s)\right]' + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-s^2}\right]\psi(s) = 0 ; s = \tanh(\alpha x) \\ \psi(-\infty) = \psi(+\infty) = 0 \end{cases} \quad (1.60)$$

Ces fonctions satisfont aussi l'équation différentielle

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi + [\alpha^2 l(l+1) \operatorname{sech}^2(\alpha x) - \alpha^2 m^2]\psi = 0 \quad (1.61)$$

qui a la forme de l'équation de Sturm-Liouville (1.26) avec $r = 1$, $p(x) = \operatorname{sech}^2(\alpha x) = 1 - \tanh^2(\alpha x)$, $q = -\alpha^2 m^2$ et $\lambda = \alpha^2 l(l+1)$. Elles forment donc un ensemble complet discret et sont orthogonales par rapport à la fonction de poids $p(x) = \operatorname{sech}^2(\alpha x)$ car nous avons :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_l^m(x) \psi_k^m(x) \operatorname{sech}^2(\alpha x) dx = \frac{2m}{2l+1} \delta_{kl} \quad (1.62)$$

Le potentiel de Pöschl-Teller a été utilisé en théorie des collisions [Lam80]. Il possède des propriétés remarquables comme l'absence de réflexion pour certaines valeurs des paramètres U_0 et α . Si on pose $U_0 = \alpha^2 \lambda(\lambda - 1)$, c'est-à-dire $\lambda = \frac{1}{2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4U_0}{\alpha^2}} \right]$, on peut

montrer[Lam80] que les coefficients d'intensité de transmission et de réflexion I_T et I_R sont donnés par

$$I_T = \sin^2 \left[\arctan \left(\frac{\sin(\pi k \alpha)}{\sin(\pi \lambda)} \right) \right], \quad I_R = \cos^2 \left[\arctan \left(\frac{\sin(\pi k \alpha)}{\sin(\pi \lambda)} \right) \right]$$

avec $k^2 = 2E$. Nous voyons que si le paramètre λ est un nombre entier, $I_T = 1$ et $I_R = 0$. Dans ce cas, l'énergie incidente est entièrement transmise et il y a absence de réflexion.

1.3.5 Formulation matricielle de l'équation de Schrödinger

Pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps (1.11), nous développons la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t)$ sur une base de fonctions Sturmienne appropriées. Nous projetons ensuite l'équation de Schrödinger sur cette base. Nous aboutissons finalement à un système d'équations différentielles ordinaires pour les coefficients dépendant du temps utilisés dans le développement de la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t)$ sur la base.

En guise d'illustration, nous donnons une formulation matricielle de l'équation de Schrödinger dépendante du temps dans le cas de l'atome d'hydrogène en présence d'un champ extérieur. La fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ décrivant la dynamique de l'électron, en présence du champ extérieur, obéit à l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \quad (1.63)$$

dans le système d'unités atomiques, où $\vec{r}$ désigne le vecteur position de l'électron par rapport au noyau. Le hamiltonien total du système $H(\vec{r}, t)$ est donné par

$$H = -\frac{1}{2} \vec{\nabla}_r^2 - \frac{1}{r} + \frac{1}{c} \vec{A}(t) \cdot \vec{p} \quad \text{dans la jauge vitesse.} \quad (1.64)$$

et

$$H = -\frac{1}{2} \vec{\nabla}_r^2 - \frac{1}{r} + \vec{E}(t) \cdot \vec{r} \quad \text{dans la jauge longueur.} \quad (1.65)$$

avec $r = |\vec{r}|$.

Nous prendrons, pour les calculs ultérieurs en rapport avec l'atome d'hydrogène,

$$\vec{A}(t) = A_0 e^{-\frac{t}{\tau_p}} \sin(\omega t) \hat{z}. \quad (1.66)$$

où $\hat{z}$ est le vecteur unitaire le long de l'axe des z , ce qui signifie que la lumière se propage comme une impulsion Gaussienne polarisée linéairement (le long de l'axe des z).

En vue de résoudre l'équation de Schrödinger (1.63), nous développons la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ sur une base de fonctions Sturmienne Coulombiennes :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{m'} \sum_{l'=m'}^L \sum_{n'=l'+1}^{N_r} a_{n', l', m'}(t) \frac{S_{n', l'}^{\kappa_c}(r)}{r} Y_{l', m'}(\hat{r}). \quad (1.67)$$

Nous multiplions ensuite chacun des membres de l'équation obtenue par $\frac{S_{n, l}^{\kappa_c}(r)}{r} Y_{l, m}^*(\hat{r})$ et nous intégrons sur tout l'espace. Dans le cas d'une polarisation linéaire, l'interaction ne couple que des états de même nombre quantique m . Nous développons $\Psi(\vec{r}, t)$ sur une base comportant les moments angulaires $l = m, m+1, \dots, m+L$ et N_r fonctions Sturmienne : $n = l+1, l+2, \dots, l+N_r$. On arrive finalement à un système d'équations différentielles ordinaires pour les $a_{n, l, m}(t)$ que l'on présente sous forme matricielle [Gro99, Hue96] :

$$i \frac{d}{dt} \mathbf{S} \Psi(t) = \mathbf{H}(t) \Psi(t), \quad (1.68)$$

où :

- Ψ est un vecteur qui contient les coefficients $a_{n, l, m}(t)$,
- $\mathbf{S}$ est la matrice de recouvrement,
- $\mathbf{H}$ est une matrice bloc-tridiagonale associée au Hamiltonien total. Les blocs diagonaux sont tridiagonaux et correspondent au Hamiltonien atomique. Les autres blocs correspondent au Hamiltonien d'interaction.

Dans une base réelle, l'hermiticité du hamiltonien fait que la norme (habituelle) de la solution $\Psi(\vec{r}, t)$ de l'équation (1.68), définie par

$$\|\Psi(\vec{r}, t)\|^2 = \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \int d\vec{r} \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = \int d\vec{r} |\Psi(\vec{r}, t)|^2. \quad (1.69)$$

soit conservée dans le temps, et plus précisément égale à 1. En pratique, le développement (1.67) doit être tronqué à cause des limitations imposées par l'outil informatique. La fonction $\Psi(\vec{r}, t)$ est approximée par une combinaison linéaire $\Psi_N(\vec{r}, t)$ de N fonctions de carré sommable. Nous écrivons :

$$\Psi_N(\vec{r}, t) = \sum_m \sum_{l=m}^{N_l} \sum_{n=l+1}^{N_r} a_{n,l,m}(t) \frac{S_{n,l}^{\kappa_c}(r)}{r} \Upsilon_{l,m}(\hat{r}). \quad (1.70)$$

Le nombre d'hamoniques sphériques est pris suffisamment grand pour avoir la convergence dans l'espace angulaire. La norme (habituelle) de la fonction d'onde est alors donnée par la relation

$$\begin{aligned} \langle \Psi_N(t) | \Psi_N(t) \rangle &= \int d\vec{r} \Psi_N^*(\vec{r}, t) \Psi_N(\vec{r}, t) \\ &= \sum_m \sum_{l=m}^{N_l} \sum_{n=l+1}^{N_r} \sum_{n'=l+1}^{N_r} a_{n,l,m}^*(t) \mathcal{O}_{nn'}^{(l)} a_{n',l,m}(t), \end{aligned} \quad (1.71)$$

avec

$$\mathcal{O}_{nn'}^{(l)} = \int_0^\infty dr \frac{1}{r^2} [S_{n,l}^{\kappa_c}(r)]^* S_{n',l}^{\kappa_c}(r). \quad (1.72)$$

Cette norme est conservée dans le temps dans une base réelle. Cependant, lors d'un processus d'ionisation, certains fragments du système peuvent sortir de la zone couverte par la base finie. Dans ce cas, si la base est réelle, un fragment du système qui atteint la frontière de la zone décrite par cette base avant la fin de l'interaction avec le champ extérieur va être réfléchi et revenir vers le noyau, de manière à ce que la norme (1.71) soit conservée. Mais les probabilités d'ionisation ne seront pas correctes à cause de ces réflexions. Ces dernières peuvent évidemment être évitées en augmentant la taille de la base. On peut aussi les éviter en travaillant avec une base de fonctions Sturmienne complexes ou encore, ce qui revient au même, en utilisant une dilatation complexe des coordonnées radiales du hamiltonien. Lorsqu'une base complexe est utilisée, la surface de la zone décrite par elle se comporte comme une paroi absorbante. En fait, la norme de la fonction d'onde (1.71) sur une base complexe n'est pas conservée dans le temps parce que le hamiltonien n'est plus hermitien ; elle représente, pour des temps longs, la probabilité pour le système de rester intact [Pir94].

Il importe de signaler que quand on travaille avec une base complexe, on doit faire appel à des méthodes d'accélération de la convergence, entre autres les approximants de Padé [Bak81, Ben78, Bre78, Wen85] (voir annexe C) pour évaluer des sommes telles que (1.71). Cette remarque est cruciale pour le calcul de la norme. Pour bien comprendre cela, rappelons que les fonctions Sturmienne radiales sont définies par

$$S_{n,l}^{\kappa_c}(r) = N_{n,l}^{\kappa_c} r^{l+1} e^{-\kappa_c r} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa_c r) \quad ,$$

où $N_{n,l}^{\kappa_c}$ est un facteur de normalisation défini par :

$$N_{n,l}^{\kappa_c} = \sqrt{\frac{\kappa_c}{n}} (2\kappa_c)^{l+1} \left[\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \right]^{\frac{1}{2}} .$$

κ_c vérifie la relation

$$\kappa_c = \kappa e^{-i\theta} ,$$

où $\kappa \in \mathbb{R}^+$ et θ est un paramètre réel. Comme nous l'avons mentionné précédemment, le remplacement du paramètre de dilatation κ (réel positif) par le paramètre complexe κ_c dans la définition des fonctions Sturmiennes Coulombiennes a des conséquences très importantes. Il permet à la base d'avoir un comportement asymptotique adéquat pour les conditions aux frontières du problème que l'on désire étudier. Si, par exemple, on veut étudier la photoionisation de l'atome d'hydrogène, il faut prendre $\kappa_c = \kappa e^{-i\theta}$ avec $\theta \in]0, \frac{\pi}{2}[$. Ainsi, le facteur $e^{-\kappa_c r}$ intervenant dans la formule des Sturmiennes possède à la fois le caractère d'une voie fermée et celui d'une voie ouverte pour les ondes sortantes. Par contre, si l'on utilisait κ (réel positif), la base Sturmienne aurait seulement le caractère d'une voie fermée. Elle décrirait, par conséquent, le système dans une région limitée de l'espace. La norme $\langle \Psi_N(t) | \Psi_N(t) \rangle$ sur la base complexe $\{S_{n,l}^{\kappa_c}(r) Y_{lm}(\hat{r})\}$ est une fonction non-analytique de κ_c puisqu'elle dépend à la fois de κ_c et κ_c^* . Ceci est dû au fait que, pour le problème considéré (photoionisation de l'atome d'hydrogène), $\Psi_N^*(\vec{r}, t)$ est composée d'ondes entrantes qui ne peuvent pas être correctement représentées sur une base de fonctions ayant le caractère d'ondes sortantes. En conséquence, la somme sur n et n' intervenant dans le membre de droite de (1.71) diverge lorsque N_r croît, t étant fixé. Nous pouvons éviter cette divergence en utilisant la *sommation de Padé* à la place de la somme directe. Pour ce faire, nous formons une suite de N_r sommes partielles obtenues à partir du membre de droite de (1.71) en faisant varier n et n' de 1 à

M , avec $1 \leq M \leq N_r$. Nous utilisons alors l'algorithme epsilon de Wynn [Wen85, Wyn56, Wyn66] (Voir annexe D) pour construire les approximants diagonaux de Padé associés à la suite des sommes partielles obtenues. La méthode des approximants de Padé permet d'extrapoler les résultats que l'on aurait avec une base infinie. C'est une technique d'accélération de la convergence en ce sens qu'elle permet le prolongement analytique des fonctions.

A chaque instant, la valeur de la norme de la fonction d'onde totale du système atome d'hydrogène + champ obtenue en utilisant les approximants de Padé donne la probabilité de trouver l'électron à l'intérieur de la zone de l'espace représentée par la base. Cette valeur reste égale à 1 jusqu'au temps où l'électron quitte cette zone, appelée *temps critique* t_c . Ce temps est caractérisé par une diminution brusque de la population à l'intérieur de la zone en question.

Toutes les remarques que nous venons de faire sur la norme sont illustrées par la figure 1.3. Nous avons utilisé l'algorithme de Runge-Kutta pour propager, dans le temps, la fonction d'onde totale $\Psi(\vec{r}, t)$ du système atome d'hydrogène + champ.

Intéressons-nous maintenant au calcul du spectre en énergie du photoélectron. Pour calculer le spectre en énergie, nous propageons dans le temps la fonction d'onde totale du système développée dans la base Sturmienne. Après cette propagation, la solution $\Psi(\vec{r}, t = t_{final})$ est projetée dans la base atomique $\{|\Psi_{E,l,m}\rangle\}$. $\Psi(\vec{r}, t = t_{final})$ dans la base atomique nous donne les amplitudes de probabilité $b_{E,l,m} \equiv \langle \Psi_{E,l,m} | \Psi(t_f) \rangle$ pour les états représentés par la base. L'interprétation donnée $|\langle \Psi_{E,l,m} | \Psi(t_f) \rangle|^2$ est différente suivant que E est négatif ou positif :

- Pour $E < 0$, $|\langle \Psi_{E,l,m} | \Psi(t_f) \rangle|^2$ est la probabilité pour le système de se trouver dans l'état d'énergie E , de moment angulaire l et de nombre quantique azimutal m .
- Pour $E > 0$, si E_i et E_{i+1} sont deux énergies consécutives, $|\langle \Psi_{E_{i+1},l,m} | \Psi(t_f) \rangle|^2$ représente la probabilité pour le système de se trouver dans un état du continuum de moment angulaire l , de nombre quantique azimutal m et d'énergie comprise entre E_i et E_{i+1} . Dans ce cas, la probabilité pour l'électron d'avoir une énergie comprise entre E et $E + dE$ s'écrit :

$$dP(E) = \sum_{l,m} |\langle \Psi_{E,l,m} | \Psi(t_f) \rangle|^2 dE. \quad (1.73)$$

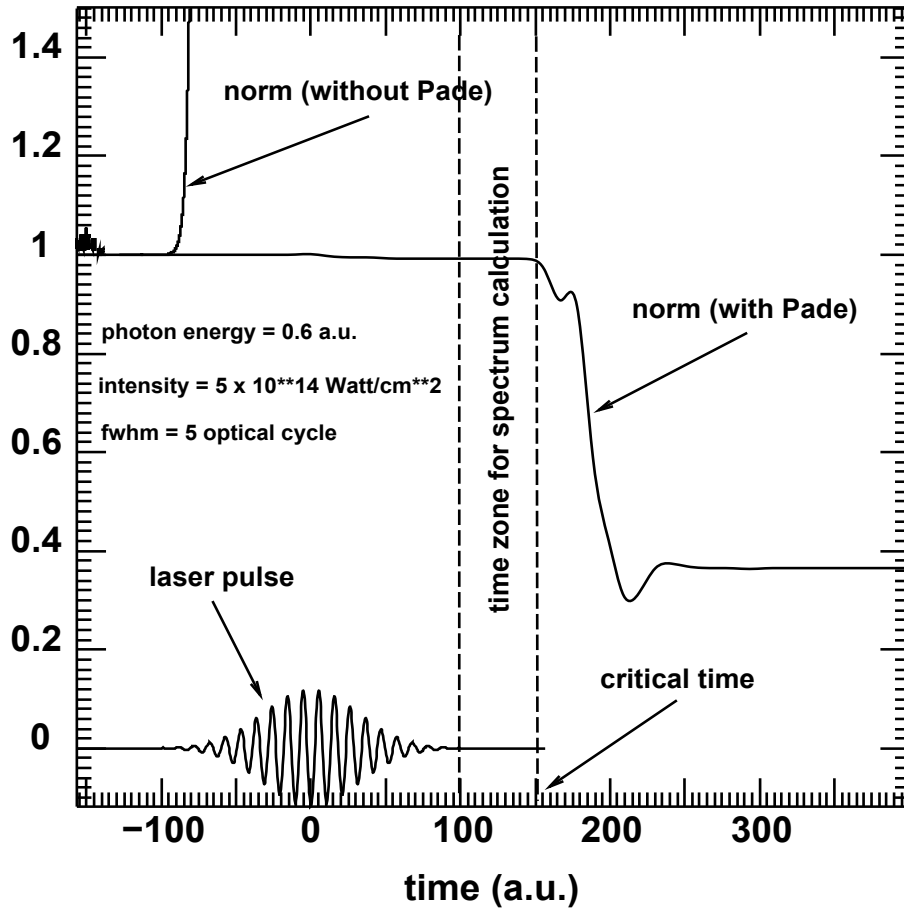


FIG. 1.3 – Norme (en fonction du temps) de la fonction d'onde pour un atome d'hydrogène se trouvant initialement dans l'état fondamental et qui est exposé à une impulsion laser Gaussienne polarisée linéairement. La fréquence du champ laser vaut 0.6 u.a. , son intensité maximum $5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ et sa durée 5 périodes optiques.

Notons que si nous voulons avoir le spectre d'énergie de l'électron pour une voie particulière, nous devons le calculer à un certain moment après le passage du pulse mais avant le temps critique. En effet, après le temps critique, du flux a déjà quitté la région décrite par la base et il n'est plus possible d'avoir une information bien détaillée sur l'évolution du système.

La figure 1.4 présente le spectre d'énergie du photoélectron. Le champ laser a été choisi comme précédemment. Les valeurs de κ et θ sont celles utilisées dans le calcul de la norme, mais $N_r = 240$. Ce spectre ressemble en grande partie à celui que l'on obtient en travaillant avec une base Sturmienne réelle mais en prenant $N_r = 800$. C'est seulement lorsque le continuum devient très peu peuplé (partie droite du spectre) que des différences apparaissent.

A partir de notre spectre, nous avons calculé la probabilité d'ionisation totale et trouvé 0.634092.

1.4 La méthode de dilatation complexe du Hamiltonien

Cette méthode, aussi appelée la *méthode de coordonnées complexes*, est utilisée intensivement en théorie de la diffusion pour le calcul des résonances en physique atomique et moléculaire [Rei82]. Les différents types de résonance sont des états non-stationnaires (ou quasi-liés) possédant un temps de vie suffisamment long pour pouvoir être bien définies. La plus simple et la plus naïve description mathématique de tels états s'obtient en supposant que ces résonances ressemblent à des états stationnaires dans le sens où ils sont "localisés" dans l'espace (à $t=0$), et que leur évolution dans le temps est donnée par :

$$\Psi_R(t) = \exp\left(\frac{-iE_R t}{\hbar}\right) \Psi_R(0), \quad (1.74)$$

qui est semblable à l'équation d'évolution habituelle des états stationnaires, sinon que l'énergie E_R est à présent complexe :

$$E_R = E_{res} - \frac{i}{2}\Gamma = |E_R| e^{-i\beta}. \quad (1.75)$$

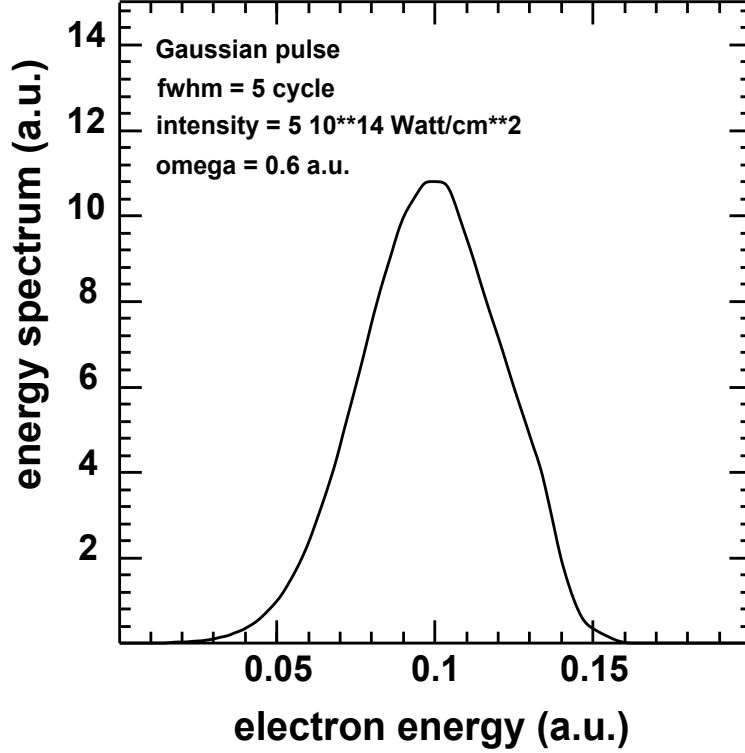


FIG. 1.4 – Spectre d’énergie de l’électron de l’atome d’hydrogène se trouvant initialement dans l’état fondamental et qui est exposé à une même impulsion laser que précédemment.

E_{res} et Γ sont réels et $\Gamma \geq 0$. La présence du facteur “ $-\frac{i}{2}\Gamma$ ” conduit à une décroissance exponentielle et permet donc la description d’états pouvant se désintégrer. Cette description “naïve”, si elle permet, à partir du calcul a priori de l’énergie E_R , la prédiction des énergies de formation et des temps de vie de tels états, pose néanmoins le problème des énergies complexes à partir d’un hamiltonien hermitien. L’introduction de coordonnées complexes en mécanique quantique non-relativiste conduit directement à produire des opérateurs (non-hermitiens) ayant des valeurs propres complexes et des fonctions propres, associées à ces résonances, de carré sommable [Rei82, Sie39]. Cette méthode permet en principe de calculer les énergies et les temps de vie de systèmes pouvant se désintégrer. Une autre utilisation importante de la méthode de dilatation complexe est celle faite dans le domaine des calculs en théo-

rie de la diffusion ou de la propagation dans le temps de paquets d'onde [Pir94, Fai87, McC89, McC91].

La dilatation complexe du Hamiltonien s'obtient en remplaçant la coordonnée réelle $r = |\vec{r}|$ par une valeur complexe,

$$r \longrightarrow r e^{i\theta}, \quad (1.76)$$

dans l'équation de Schrödinger

$$\mathcal{H}(r)\Psi(r) = E\Psi(r). \quad (1.77)$$

Notons que θ est un paramètre réel appelé *angle de rotation*. A la suite de la transformation (1.76), le Hamiltonien initial $\mathcal{H}(r)$ devient :

$$\mathcal{H}_\theta(r) = U(\theta)\mathcal{H}(r)U^{-1}(\theta) \quad (1.78)$$

qui est évidemment non-Hermitien. L'opérateur $U(\theta)$, unitaire, est appelé l'*opérateur de dilatation*. Dans l'espace de configuration, en une dimension, l'action de cet opérateur sur une fonction d'onde quelconque $\Psi(r)$ est définie par [Rei82, Moi98] :

$$U(\theta)\Psi(r) = e^{\frac{i\theta}{2}}\Psi(re^{i\theta}). \quad (1.79)$$

En vertu du *théorème d'Aguilar-Balslev-Combes* [Agu71, Bal71], le spectre d'énergie du Hamiltonien dilaté $\mathcal{H}_\theta(\vec{r})$ a les propriétés suivantes (voir figure 1.4) :

1. Les pôles correspondant aux états liés de $\mathcal{H}_\theta(\vec{r})$ sont indépendants de θ et identiques à ceux de $\mathcal{H}(\vec{r})$ pourvu que $|\theta| \leq \frac{\pi}{2}$.
2. Les seuils d'ionisation aussi sont indépendants de θ , toujours avec $|\theta| \leq \frac{\pi}{2}$.
3. Les coupures (états du continuum) qui commencent aux seuils d'ionisation sont tournées vers le bas d'un angle égal à 2θ .
4. Toutes les valeurs propres discrètes de $\mathcal{H}_\theta(\vec{r})$ sont de multiplicités finies.
5. Les pôles résonants sont découverts par les coupures si l'angle de rotation θ est supérieur à $\frac{1}{2} \text{Arg}(E_R)$ où

$$E_R = E_{res} - i\frac{\Gamma}{2} = |E_R|e^{-i\text{Arg}(E_R)} \quad (1.80)$$

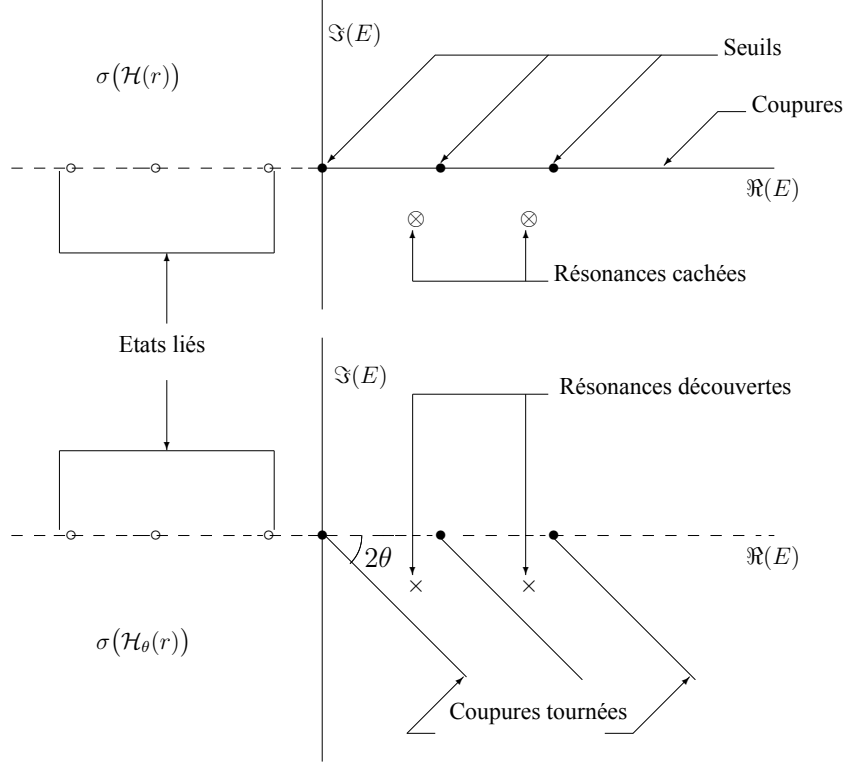


FIG. 1.5 — Spectres de $\mathcal{H}(r)$ et $\mathcal{H}_\theta(r)$ dans le plan d'énergie (E). Sous la transformation complexe $r \rightarrow re^{i\theta}$, les énergies des états liés restent invariantes ; les coupures (états du continuum) qui commencent aux seuils de diffusion sont tournées d'un angle 2θ ; les pôles résonants sont découverts par les coupures lorsque $0 < (\theta - \frac{1}{2} \text{Arg}(E_R)) < \frac{\pi}{2}$.

est une énergie complexe de résonance. Les fonctions propres $\Psi_\theta(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}e^{i\theta})$ du Hamiltonien dilaté associées à ces pôles résonants sont de carré sommable, à condition que

$$0 < (\theta - \alpha) < \frac{\pi}{2} ; \alpha = \frac{1}{2} \text{Arg}(E_R) > 0 \quad (1.81)$$

Pour nous en convaincre, considérons la fonction d'onde $\Psi(r)$, en une dimension, du hamiltonien non dilaté $\mathcal{H}(r)$ associée à l'énergie complexe $E_R = E_{res} - i\frac{\Gamma}{2}$ avec $\Gamma > 0$. Nous avons :

$$\Psi(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikr} \quad ; \quad k = |k|e^{-i\alpha} = |k|e^{-\frac{i}{2}\text{Arg}(E_R)}. \quad (1.82)$$

Par suite,

$$\Psi(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \exp(ir|k|\cos\alpha + r|k|\sin\alpha) = e^{i|k|r\cos\alpha} e^{|k|r\sin\alpha} \quad (1.83)$$

Cette fonction diverge à l'infini. Après la dilatation complexe du Hamiltonien, $\Psi(r)$ devient :

$$\begin{aligned} \Psi_\theta(r) &= \Psi(re^{i\theta}) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \exp(ikre^{i\theta}) = \exp(i|k|re^{i(\theta-\alpha)}) \\ &= \exp(i|k|r\cos(\theta-\alpha)) \exp(-|k|r\sin(\theta-\alpha)) \end{aligned} \quad (1.84)$$

Nous voyons que pour $0 < (\theta - \alpha) < \frac{\pi}{2}$, la fonction d'onde de résonance devient asymptotiquement convergente. Elle décrit, par conséquent, un état qui se désintègre exponentiellement, avec un facteur oscillant. L'équation (1.84) conduit à la conclusion que les paramètres de résonance (la position E_{res} et la largeur Γ) peuvent être obtenus en utilisant des fonctions d'onde des états liés, c'est-à-dire des fonctions de carré sommable.

La méthode de dilatation complexe permet aussi l'obtention directe de la continuation analytique de l'opérateur de Green. Voici un rappel bref de la définition et des principales propriétés de ce dernier [Mor53].

Soit un système caractérisé par un Hamiltonien $\mathcal{H}$, indépendant du temps. Les valeurs propres E_i et les vecteurs propres $|\psi_i\rangle$ de $\mathcal{H}$ sont définis par :

$$\mathcal{H}|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle \quad (1.85)$$

Les E_i forment un spectre discret et/ou continu. L'opérateur de Green (ou résolvante $G(z)$) associé à $\mathcal{H}$ est défini pour $z \in \mathbb{C}$ par :

$$G(z) = \frac{1}{z - \mathcal{H}} \quad (1.86)$$

On démontre [Coh01] que si $|u\rangle$ est un état quelconque normé, l'élément de matrice de $G(z)$ dans cet état,

$$G_u(z) \equiv \langle u | G(z) | u \rangle = \left\langle u \left| \frac{1}{z - \mathcal{H}} \right| u \right\rangle \quad (1.87)$$

est analytique dans tout le plan complexe des énergies privé de l'axe réel sur lequel il présente des singularités.

Pour étudier les propriétés analytiques de $G_u(z)$, il est commode d'introduire les états propres de $\mathcal{H}$, dont certains, $|\psi_i\rangle$, sont des états propres discrets, de valeurs propres E_i , et d'autres, $|\psi_{\vec{k}}\rangle$, appartiennent au spectre continu. La relation de fermeture sur les états propres de $\mathcal{H}$ s'écrit :

$$\sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| + \int d\vec{k} |\psi_{\vec{k}}\rangle\langle\psi_{\vec{k}}| = \mathbb{1} \quad (1.88)$$

Il est souvent commode de faire apparaître explicitement l'énergie E comme nombre quantique repérant les états du spectre continu, auquel il faut adjoindre d'autres nombres quantiques notés γ . Le changement de variable $\vec{k} \rightarrow E, \gamma$ fait apparaître alors la densité d'états dans $d\vec{k} = \rho(E, \gamma)dEd\gamma$ [Coh01] et (1.88) devient :

$$\sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| + \iint dEd\gamma \rho(E, \gamma) |\psi(E, \gamma)\rangle\langle\psi(E, \gamma)| = \mathbb{1}. \quad (1.89)$$

L'introduction de (1.89) entre $\frac{1}{z - \mathcal{H}}$ et $|u\rangle$ donne

$$G_u(z) = \sum_i \frac{|\langle u | \psi_i \rangle|^2}{z - E_i} + \iint dE' d\gamma' \rho(E', \gamma') \frac{|\langle u | \psi(E', \gamma') \rangle|^2}{z - E'}. \quad (1.90)$$

Remarquons que $G_u(z)$ contient toute l'information sur le système caractérisé par le Hamiltonien $\mathcal{H}$, puisqu'il contient toutes les valeurs propres et les vecteurs propres de $\mathcal{H}$.

Lorsque z tend vers la valeur propre discrète E_i de $\mathcal{H}$, le terme $\frac{|\langle u | \psi_i \rangle|^2}{z - E_i}$ de la somme (1.90) tend vers l'infini. Les valeurs propres discrètes de $\mathcal{H}$ sont donc des pôles pour $G_u(z)$ (sauf si $\langle u | \psi_i \rangle = 0$), admettant $|\langle u | \psi_i \rangle|^2$ pour résidus.

Supposons maintenant que z tende vers une valeur propre E du spectre continu, qui n'est pas confondue avec une valeur propre discrète. Deux situations sont possibles, suivant que la partie imaginaire de z est positive ou négative (Fig. 1.6).

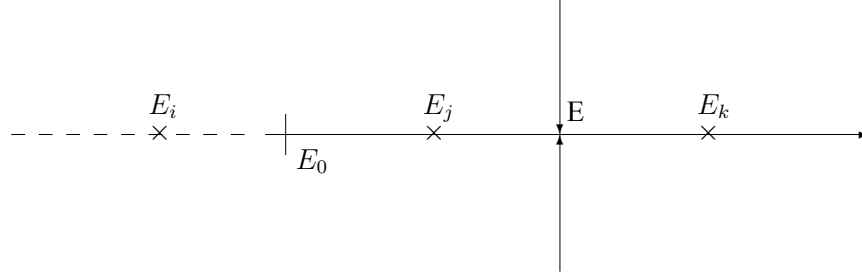


FIG. 1.6 – Valeurs propres discrètes $(E_i, E_j, \dots)$ et spectre continu de $\mathcal{H}$ (partant de E_0).

Pour le voir, il faut calculer $\lim_{\eta \rightarrow 0_+} G_u(E \pm i\eta)$. On trouve [Coh01] :

$$\lim_{\eta \rightarrow 0_+} G_u(E \pm i\eta) = \mathcal{P} \left(\int dE' \frac{f_u(E')}{E - E'} \right) \mp i\pi f_u(E), \quad (1.91)$$

où la fonction f_u est définie par

$$f_u(E') = \int d\gamma' \rho(E', \gamma') |\langle u | \psi(E', \gamma') \rangle|^2 \quad (1.92)$$

et $\mathcal{P}$ désigne la *partie principale*.

Les limites $G_u(E \pm i\eta)$, lorsque $\eta \rightarrow 0_+$, existent donc bien, mais ne sont pas les mêmes suivant que z tend vers E par valeurs positives ou négatives de la partie imaginaire (à condition que $f_u(E)$ soit non nul). On dit que la fonction $G_u(z)$ présente une *coupure* le long du spectre continu. La différence $-2i\pi f_u(E)$ entre les valeurs de $G_u(E + i\eta)$ et $G_u(E - i\eta)$ représente l'écart entre les deux lèvres de la coupure. Le point où commence la coupure, E_0 , s'appelle le point de branchement.

La fonction $G_u(z)$ est analytique dans le demi-plan supérieur. On peut la prolonger analytiquement au-delà de la coupure dans le demi-plan inférieur. La valeur prise par la fonction prolongée par continuité est différente de la valeur prise au même point par la détermination initiale de la fonction, puisque la coupure introduit justement une discontinuité. On dit que $G_u(z)$ a été prolongée dans le *deuxième feuillet de Riemann*, le plan complexe initial constituant le *premier feuillet de Riemann*.

En résumé, l'opérateur de Green sur l'axe réel des énergies dépend de la façon dont on s'approche de cet axe (à partir du demi-plan infé-

rieur ou supérieur). On définit, par conséquent, deux fonctions de Green sur l'axe réel des énergies :

$$G^{\pm}(E) = \frac{1}{E \pm i\eta - \mathcal{H}} \quad (1.93)$$

où η est un nombre réel positif très petit que l'on fait tendre vers zéro à la fin des calculs. Comme nous l'avons déjà signalé, toute propriété physique concernant le système peut être estimée à partir de l'opérateur de Green. En particulier, les énergies des résonances du système sont données par les positions des pôles complexes du prolongement analytique de $G^{\pm}(E)$. Dans le cadre de la théorie de la diffusion, ces pôles complexes coïncident avec les pôles de la matrice S . On montre [Joh83] que l'opérateur de Green associé au Hamiltonien dilaté est relié à l'opérateur de Green original par la relation

$$G(E) = \frac{1}{E - \mathcal{H}} = U^{-1}(\theta)G_{\theta}(E)U(\theta) = U^{-1}(\theta)\frac{1}{E - \mathcal{H}_{\theta}}U(\theta) \quad (1.94)$$

Notons que l'opérateur de Green du Hamiltonien dilaté ne présente aucune discontinuité sur l'axe réel. Il peut être prolongé analytiquement dans le demi-plan complexe inférieur jusqu'aux coupures tournées. En d'autres termes, la dilatation complexe du Hamiltonien, en tournant les coupures dans le plan complexe des énergies, conduit directement à la continuation analytique de l'opérateur de Green, et par conséquent aux résonances. Pour $\theta > 0$ (respectivement $\theta < 0$), l'opérateur de Green dilaté est le prolongement analytique de $G^{+}(E)$ (respectivement $G^{-}(E)$).

En guise d'illustration de l'effet de la dilatation complexe du Hamiltonien sur le spectre de ce dernier, appliquons la méthode des coordonnées complexes au modèle atomique décrit dans la section 1.3.4. Pour ce modèle atomique, l'équation de Schrödinger indépendante du temps est :

$$H_0(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.95)$$

où le Hamiltonien atomique H_0 est donné par la relation

$$H_0(x) = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - U_0 \operatorname{sech}^2(\alpha x) \quad (1.96)$$

et les fonctions propres $\psi(x)$ par l'équation (1.52) :

$$\psi(x) = A \operatorname{sech}^\beta(\alpha x) \cdot {}_2F_1\left(\frac{1}{2} + \beta + \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}}, \frac{1}{2} + \beta - \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}}; 1 + \beta; u(x)\right)$$

avec

$$\beta^2 = -\frac{2E}{\alpha^2}; \quad u(x) = \frac{1}{2} (1 - \tanh(\alpha x)) = \frac{e^{-\alpha x}}{e^{\alpha x} + e^{-\alpha x}}$$

et A une constante de normalisation.

Si nous développons la fonction d'onde $\psi(x)$ sur une base de fonctions Sturmienne adéquate, les fonctions $\psi_l^m(x)$ définies dans la section 1.3.4, nous obtenons :

$$\psi(x) = \sum_k a_k \psi_k^1(x) = \sum_k \sqrt{\frac{\alpha}{k(k+1)}} a_k P_k^1(\tanh(\alpha x)) \quad (1.97)$$

où nous avons pris $m = 1$. Ainsi, l'équation aux valeurs propres (1.92) peut être présentée sous une forme matricielle (annexe A) :

$$\mathbf{H}_0 \psi = E \mathbf{S} \psi \quad (1.98)$$

où ψ est un vecteur qui contient les coefficients a_k , $\mathbf{S}$ la matrice de recouvrement et $\mathbf{H}_0$ la matrice du Hamiltonien atomique.

Le problème aux valeurs propres généralisées (1.98) est résolu en utilisant les algorithmes se trouvant dans la librairie LAPACK. Les énergies propres des états liés obtenues pour quelques valeurs des paramètres α et U_0 du potentiel de Pöschl-Teller sont contenues dans les tableaux 1.1 et 1.2. Ces tableaux contiennent aussi les valeurs exactes des énergies en question calculées analytiquement à l'aide de la relation (1.55).

A la suite de la transformation $x \mapsto x e^{i\theta}$ (rotation complexe des coordonnées), le Hamiltonien initial

$$H_0(x) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - U_0 \operatorname{sech}^2(\alpha x)$$

devient :

$$H_{0,\theta}(x) = -\frac{1}{2} e^{-2i\theta} \frac{d^2}{dx^2} - U_0 \operatorname{sech}^2(\alpha x e^{i\theta}) \quad (1.99)$$

et l'équation de Schrödinger (1.95) se transforme en

$$H_{0,\theta}(x)\psi_\theta(x) = E_\theta\psi_\theta(x) \quad (1.100)$$

avec

$$\psi_\theta(x) = e^{\frac{i}{2}\theta} \psi(xe^{i\theta}) = A \operatorname{sech}^{\beta_\theta}(\alpha x_\theta) \cdot {}_2F_1\left(\frac{1}{2} + \beta_\theta + \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}}, \frac{1}{2} + \beta_\theta - \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}}; 1 + \beta_\theta; u(x_\theta)\right) \quad (1.101)$$

où

$$\begin{aligned} x_\theta = xe^{i\theta} \quad ; \quad u(x_\theta) &= \frac{1}{2} (1 - \tanh(\alpha x_\theta)) = \frac{e^{-\alpha x_\theta}}{e^{\alpha x_\theta} + e^{-\alpha x_\theta}} ; \\ \beta_\theta^2 &= \frac{-2E_\theta}{\alpha^2} = \frac{-2E}{\alpha^2} e^{-2i\theta} \end{aligned} \quad (1.102)$$

et A une constante de normalisation

Nous voyons, à partir de l'équation (1.99), que l'énergie cinétique est multipliée par le facteur $e^{-2i\theta}$ suite à la rotation complexe des coordonnées d'un angle θ .

Pour résoudre l'équation de Schrödinger (1.100), nous utilisons l'*approche directe* de la méthode de coordonnées complexes. Cette approche consiste en la diagonalisation du Hamiltonien dilaté $H_{0,\theta}(x)$ sur

-7.9999999998198	-8.00000000000000
-4.4999999999989	-4.50000000000000
-1.99999999927369	-2.00000000000000
-0.50000000000132	-0.50000000000000
0.13590244775768	
0.31307449748590	
0.56967701229864	
0.91097063992022	
1.33732866811694	

TAB. 1.1 – Colonne de gauche : les 10 premières énergies trouvées numériquement avec le nombre de sturmiennes $n_{sturm} = 200$, $U_0 = 10$, $\alpha = 1$. Colonne de droite : les énergies des états liés calculées analytiquement pour les mêmes valeurs de U_0 et α .

-36.90705501815657	-36.90705501815107	-36.90705501815724
-30.98036505447205	-30.98036505447024	-30.98036505447170
-25.57207509078676	-25.57207509078676	-25.57207509078616
-20.68218512710081	-20.68218512710023	-20.68218512710063
-16.31069516341661	-16.31069516341280	-16.31069516341510
-12.45760519972961	-12.45760519972997	-12.45760519972956
-9.12291523604311	-9.12291523603870	-9.12291523604403
-6.30662527235863	-6.30662527235905	-6.30662527235850
-4.00873530866912	-4.00873530866274	-4.00873530867296
-2.22924534496373	-2.22924534498739	-2.22924534498743
-0.96815394706148	-0.96815533964008	-0.96815538130189
-0.22545894956269	-0.22546423908019	-0.22546541761636
0.04688044154186	0.03220200832103	
0.16652582090834	0.10842739262227	
0.39110693888963	0.25195912677297	
0.71362290513084	0.45424021373043	
1.14850980999395	0.72557159655012	

TAB. 1.2 – Les deux premières colonnes : les 17 premières énergies trouvées numériquement avec le nombre de sturmiennes $nsturm = 200$ (première colonne) et $nsturm = 500$ (deuxième colonne), $U_0 = 40$, $\alpha = 0.72$. Colonne de droite : les énergies des états liés calculées analytiquement pour les mêmes valeurs de U_0 et α . Nous voyons que si la dimension de la base est suffisamment grande, les résultats numériques sont très proches de ceux analytiques.

un ensemble fini de fonctions réelles orthogonales appropriées, l'ensemble $\{\psi_j^1(x)\}$ pour notre cas. Nous développons la fonction d'onde complexe $\psi_\theta(r) = \psi(re^{i\theta})$ de $H_{0,\theta}(x)$ sur la base $\{\psi_j^1(x)\}$ avec des coefficients complexes :

$$\psi_\theta(x) = \sum_{j=1}^N c_j(\theta) \psi_j^1(x) \quad (1.103)$$

Utilisant le *principe variationnel de Rayleigh–Ritz* [Coh73, Nou01],

$$\delta \left[\frac{\langle \psi_\theta | \mathcal{H}_{0,\theta} | \psi_\theta \rangle}{\langle \psi_\theta | \psi_\theta \rangle} \right] = 0, \quad (1.104)$$

nous obtenons, pour les $c_j(\theta)$:

$$\sum_{k=1}^N \left(H_{0,jk}(\theta) - E S_{jk} \right) c_j(\theta) = 0; \quad j = 1, 2, \dots, N; \quad (1.105)$$

où

$$H_{0,jk}(\theta) = \langle \psi_j^1 | H_{0,\theta} | \psi_k^1 \rangle = \int_0^\infty \psi_j^1(x) H_0(xe^{i\theta}) \psi_k^1(x) dx, \quad (1.106)$$

$$S_{jk} = \langle \psi_j^1 | \psi_k^1 \rangle = \int_0^\infty \psi_j^1(x) \psi_k^1(x) dr, \quad j, k = 1, 2, \dots, N \quad (1.107)$$

Les $H_{0,jk}(\theta)$ sont les composantes de la matrice non-Hermitienne $H_0(\theta)$ représentant le Hamiltonien dilaté $H_{0,\theta}(x)$ dans la base réelle $\{\psi_j^1(x)\}$:

$$\mathbf{H}_0(\theta) = \left(\langle \psi_j^1 | H_0(re^{i\theta}) | \psi_k^1 \rangle \right)_{j,k=1}^N \quad (1.108)$$

où N désigne la dimension de la base. Les S_{jk} sont les composantes de la matrice de recouvrement $\mathbf{S}$.

Le système d'équations (1.105) peut être écrite sous forme matricielle :

$$\mathbf{H}_0(\theta) \mathbf{C}(\theta) = E_\theta \mathbf{S} \mathbf{C}(\theta). \quad (1.109)$$

avec

$$\mathbf{C}(\theta) = \begin{bmatrix} c_1(\theta) \\ c_2(\theta) \\ \vdots \\ c_N(\theta) \end{bmatrix} \quad (1.110)$$

Les figures 1.7 à 1.10 représentent les spectres de $H_0(x)$ et $H_{0,\theta}(x)$ pour quelques valeurs de α , U_0 et θ , dans le plan complexe des énergies, obtenues en résolvant les problèmes aux valeurs propres (1.98) et (1.110) à l'aide des routines de la librairie Lapack. Nous avons utilisé la quadrature de Gauss-Legendre pour calculer les éléments de la matrice associée au potentiel de Pöschl-Teller tourné. Nous voyons que les énergies des états liés ne sont pas modifiées par une dilatation complexe du Hamiltonien. La partie du spectre associée au continuum discrétisé tourne d'un angle égal à -2θ , pourvu que l'on utilise une même échelle pour les parties réelles et imaginaires des énergies. Si on utilise deux échelles différentes, on a l'impression que le continuum tourne d'un angle différent de -2θ . Pour déterminer l'angle de rotation complexe graphiquement, il faut nécessairement tenir compte du rapport des deux échelles.

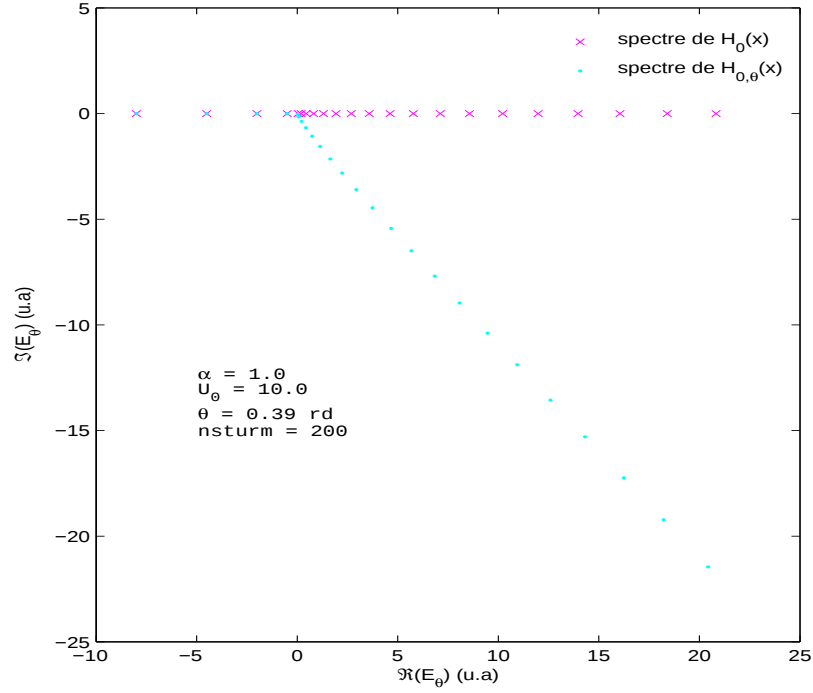


FIG. 1.7 – spectres de $H_0(x)$ et $H_{0,\theta}(x)$ pour $\alpha = 1.0$, $U_0 = 10.0$ $\theta = 0.39 \text{ rad}$ et le nombre de Sturmienne $nsturm = 200$.

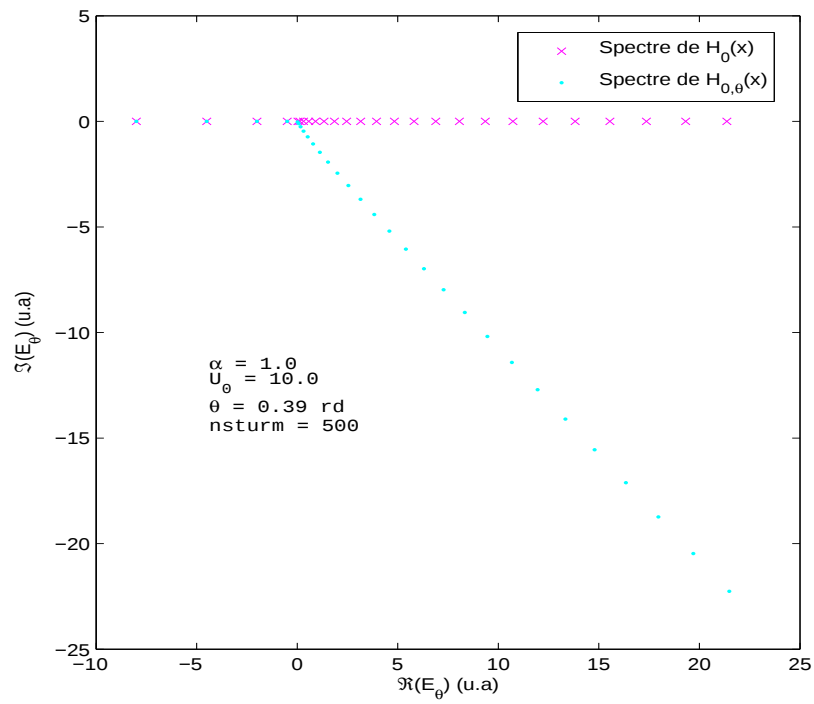


FIG. 1.8 – Même chose que précédemment, mais avec $nsturm = 500$. Nous voyons que la densité d'états dans le continuum augmente quand on augmente la dimension de la base.

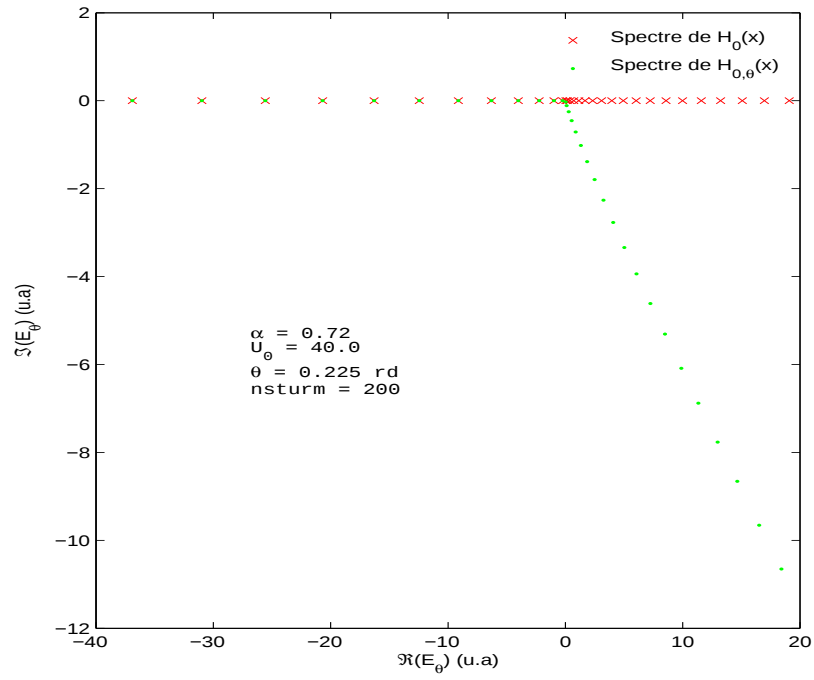
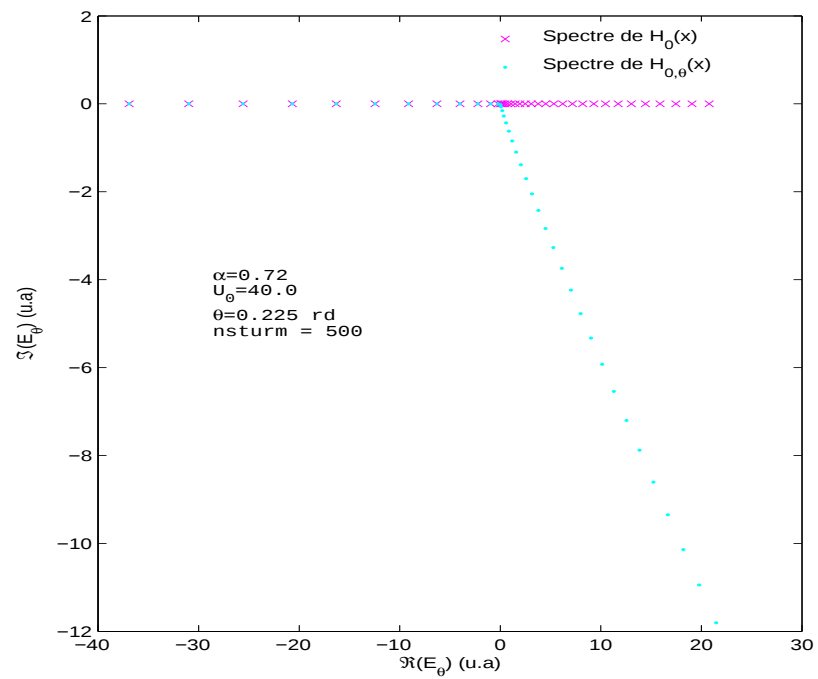


FIG. 1.9 – spectres de $H_0(x)$ et $H_{0,\theta}(x)$ dans le cas où $\alpha = 0.72$, $U_0 = 40.0$, $\theta = 0.225 \text{ rad}$ et $nsturm = 200$.

FIG. 1.10 – Même chose que précédemment, mais avec $nsturm = 500$.

Nous allons, pour le moment, montrer que les fonctions $\psi_\theta(x)$ données par l'expression (1.101) sont solutions de l'équation de Schrödinger (1.100). Nous représentons graphiquement les fonctions

$$f_G(x) \equiv H_{0,\theta}(x)\psi_\theta(x) = \left[-\frac{1}{2}e^{-2i\theta} \frac{d^2}{dx^2} - U_0 \operatorname{sech}^2(\alpha x e^{i\theta}) \right] \psi_\theta(x) \quad (1.111)$$

et

$$f_D(x) \equiv E_\theta \psi_\theta(x) \quad (1.112)$$

en fonctions de x pour quelques valeurs de α , U_0 , E et θ arbitrairement choisies, et ce pour vérifier que ces deux fonctions sont identiques.

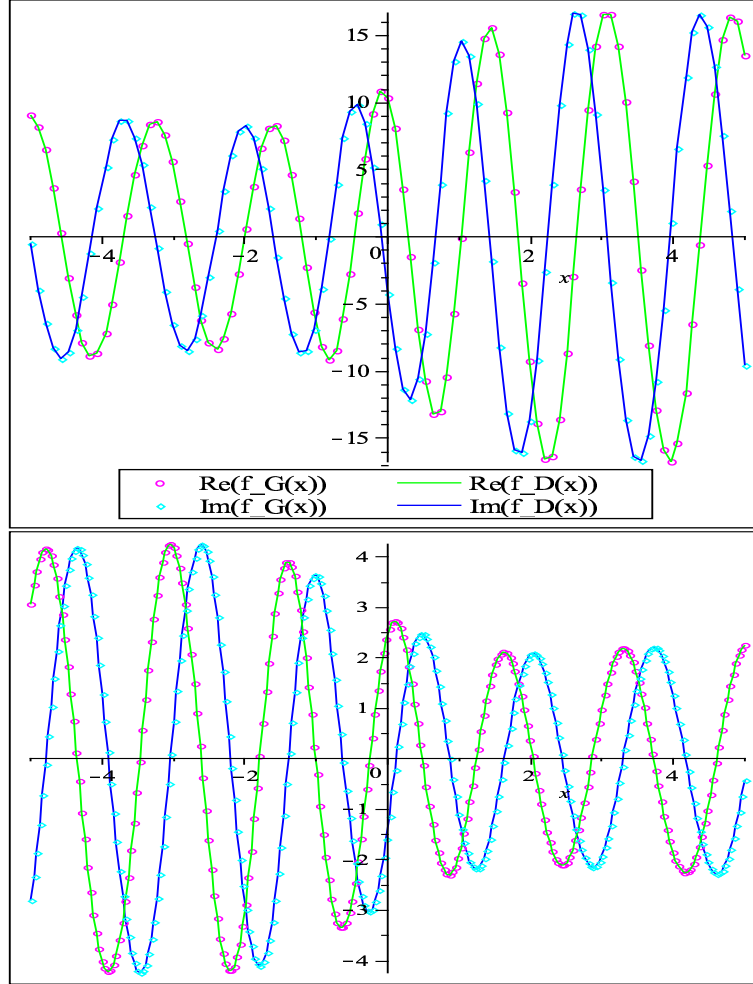


FIG. 1.11 – Graphes des parties réelles et imaginaires de $f_G(x) \equiv \left[-\frac{1}{2}e^{-2i\theta} \frac{d^2}{dx^2} - U_0 \text{sech}^2(\alpha x e^{i\theta}) \right] \psi_\theta(x)$ et $f_D(x) \equiv E_\theta \psi_\theta(x)$ pour $\alpha = 0.5$, $U_0 = 3.0$, $E = 6.177$ u.a et $\theta = 0.2$ rad. Nous avons utilisé l'expression (1.101) pour la fonction $\psi_\theta(x)$ avec $A=1$. **En haut** : β_θ est lié à l'énergie E et l'angle de rotation θ par la relation $\beta_\theta = i\sqrt{\frac{2E}{\alpha}}e^{-i\theta}$. **En bas**, β_θ est lié à E et θ par la relation $\beta_\theta = -i\sqrt{\frac{2E}{\alpha}}e^{-i\theta}$. Cette courbe a été tracée à l'aide de Maple 11.

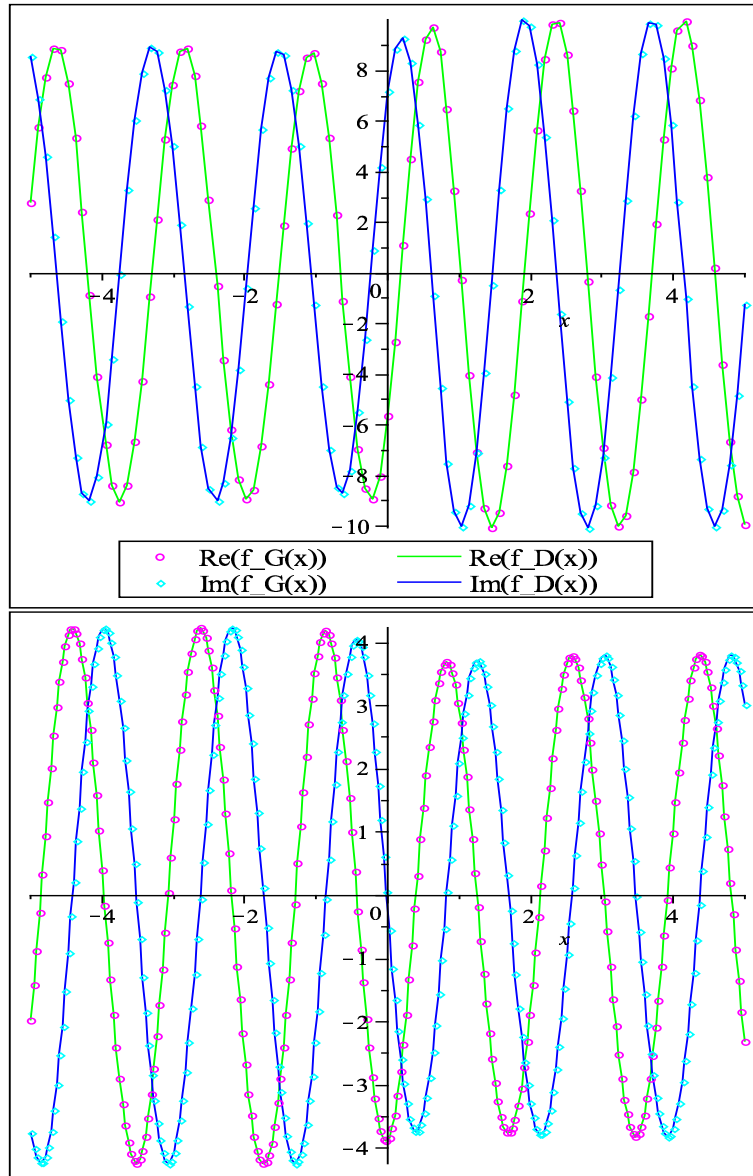


FIG. 1.12 – Même chose que précédemment, à part que $\alpha = 1.0$ et $U_0 = 1.0$.

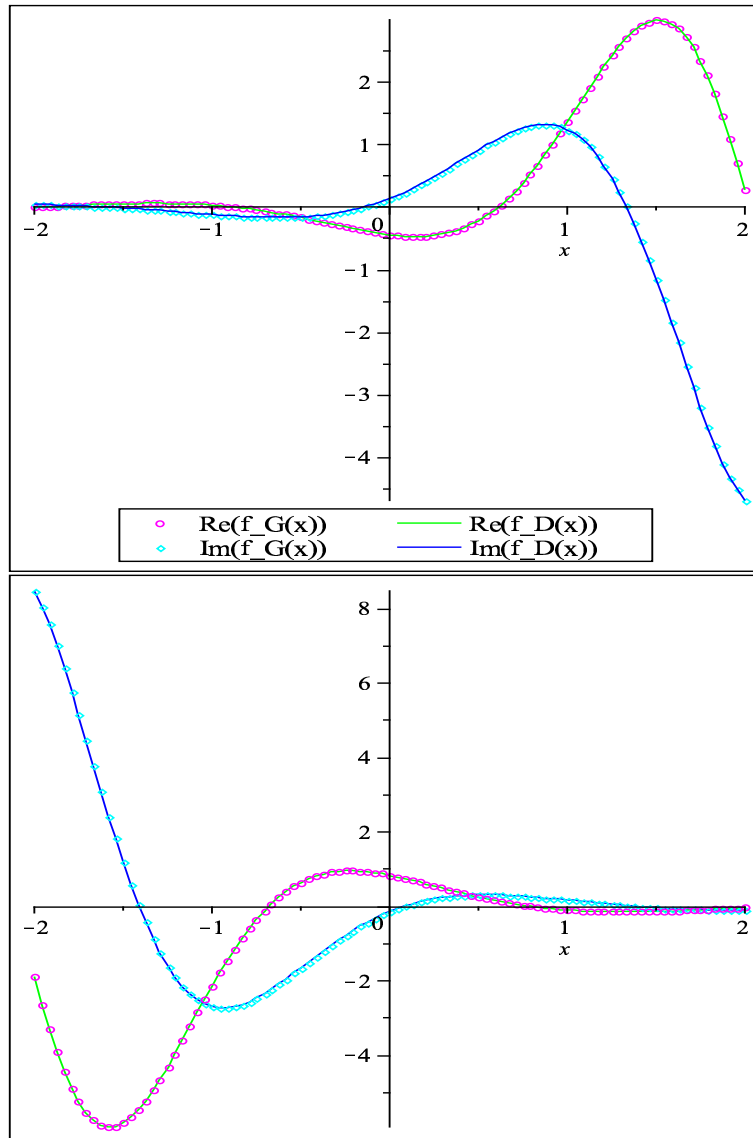


FIG. 1.13 – Même chose que pour la figure 1.11, mais avec $E = 0.87$ u.a et $\theta = 0.75$ rad.

1.5 Résolution numérique de l'ESDT par une méthode explicite

Comme nous l'avons vu dans le paragraphe 1.3.5 pour le cas de l'atome d'hydrogène, l'utilisation de la méthode spectrale dans le traitement de l'ESDT conduit, en général, à une équation matricielle de type

$$i \frac{d}{dt} \mathbf{S} \Psi(t) = \{ \mathbf{H}_0 + g(t) \mathbf{V} \} \Psi(t) \quad (1.113)$$

où $\mathbf{V}$ est la matrice associée à l'opérateur dipolaire (dilaté). $\mathbf{H}_0$ et $\mathbf{S}$ sont respectivement les matrices du Hamiltonien atomique (tourné) et de recouvrement sur une base de fonctions Sturmienne. $g(t)$ est une fonction scalaire dépendante du temps :

$$\begin{cases} g(t) = E(t) & \text{en jauge longueur} \\ g(t) = -iA(t) & \text{en jauge vitesse} \end{cases}$$

$\Psi(t)$ est l'état du système à l'instant t représenté sous la forme d'un vecteur. Nous avons omis l'indice θ pour simplifier les notations.

De manière générale, $\mathbf{H}_0$ et $\mathbf{S}$ sont respectivement des matrices complexe et réelle symétriques. La matrice $\mathbf{V}$ est complexe symétrique en jauge longueur et complexe antisymétrique en jauge vitesse. Lorsque le paramètre de rotation complexe θ est nul, $\mathbf{H}_0$ et $\mathbf{V}$ deviennent réelles. Cependant, $\mathbf{V}$ reste symétrique en jauge longueur et antisymétrique en jauge vitesse.

La résolution de l'ESDT dans une base des fonctions de carrés sommables pose des problèmes à cause de la "raideur" du système d'équations différentielles obtenu à l'issue de la formulation matricielle de cette équation. La notion de "raideur" qui est expliquée dans la section 1.5.2 nous force soit à propager la fonction d'onde dans la base atomique, soit à utiliser une méthode implicite dans la base sturmienne. Les méthodes implicites présentent un inconvénient dans la mesure où elles nécessitent la résolution de systèmes d'équations algébriques de grande dimension à chaque pas d'intégration sur le temps.

1.5.1 Changement de base

L'intérêt du changement de base concerne la structure des matrices de recouvrement et du Hamiltonien atomique. En effet, dans la base

atomique, ces deux matrices sont diagonales, ce qui n'est pas en général le cas dans la base Sturmienne. D'autre part, le changement de base nécessite la diagonalisation de matrices qui peuvent être de grande dimension.

Nous passons de la base Sturmienne (indiquée par s) à la base atomique (indiquée par a) de manière simple. Nous diagonalisons en premier lieu S à l'aide d'une matrice $\tilde{T}$ (matrice orthogonale contenant les vecteurs propres de la matrice de recouvrement) telle que

$$\tilde{T}^t S \tilde{T} = s \quad (1.114)$$

où s est la matrice diagonale dont les éléments diagonaux sont les valeurs propres de S . En définissant une matrice T telle que

$$T = \tilde{T} s^{-\frac{1}{2}}, \quad (1.115)$$

cette matrice T possède la propriété suivante :

$$T^t S T = 1 \quad (1.116)$$

Dans ces conditions, le système d'équations (1.113) devient :

$$i \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}(t) = \left\{ \tilde{H}_0 + g(t) \tilde{V} \right\} \tilde{\Psi}(t) \quad (1.117)$$

avec

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 &= T^t H_{0,s} T, \quad \tilde{V} = T^t V_s T, \quad \tilde{\Psi}(t) = T^{-1} \Psi_s(t) \\ &= s^{\frac{1}{2}} \tilde{T}^t \Psi_s(t) \end{aligned} \quad (1.118)$$

Puisqu'après cette transformation la matrice $\tilde{H}_0$ reste complexe symétrique, on peut trouver une matrice orthogonale P ($P^t P = P P^t = 1$) qui la diagonalise. Si h est la matrice diagonale dont les éléments diagonaux sont les valeurs propres de $\tilde{H}_0$, on a :

$$P^t \tilde{H}_0 P = h \quad (1.119)$$

Finalement, l'équation (1.117) devient :

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_a(t) = [H_{0,a} + g(t) V_a] \Psi_a(t) \quad (1.120)$$

avec

$$\mathbf{H}_{0,a} = \mathbf{h} = \left(\mathbf{P}^t \mathbf{s}^{-\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{T}}^t \right) \mathbf{H}_{0,s} \left(\tilde{\mathbf{T}} \mathbf{s}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{P} \right), \quad (1.121)$$

$$\Psi_a(t) = \mathbf{P}^t \tilde{\Psi}(t) = \left(\mathbf{P}^t \mathbf{s}^{\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{T}}^t \right) \Psi_s(t), \quad (1.122)$$

$$\mathbf{V}_a = \left(\mathbf{P}^t \mathbf{s}^{-\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{T}}^t \right) \mathbf{V}_s \left(\tilde{\mathbf{T}} \mathbf{s}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{P} \right) \quad (1.123)$$

1.5.2 Caractère “raide” du problème

La notion de “raideur” du système peut s’expliquer de la manière suivante.

Dans la base atomique, les différentes composantes énergétiques du paquet d’onde oscillent essentiellement aux fréquences propres, c’est-à-dire aux énergies propres du système. Lorsqu’on augmente la taille du système, la diagonalisation du hamiltonien atomique génère des énergies propres de plus en plus grandes. Ce sont précisément ces énergies propres élevées qui contrôlent le pas d’intégration sur le temps. Ce pas d’intégration devient petit dans la mesure où il est proportionnel à l’inverse de ces énergies. En travaillant dans la base atomique, on s’attend à ce que les états de très hautes énergies ne jouent pas de rôle significatif. On peut donc les éliminer. Par ailleurs, on peut aussi travailler dans la représentation d’interaction, ce qui revient à extraire l’évolution libre du système.

Dans la base sturmienne, chaque composante contient toutes les énergies propres, forçant le pas d’intégration à devenir très petit, d’où la “raideur” du système. Pour éviter ce problème de “raideur”, on peut utiliser une méthode implicite. Mais cela nécessite la résolution de gros systèmes d’équations algébriques à chaque pas d’intégration sur le temps. Toutefois, une méthode explicite impliquant des produits matrice-vecteur et la résolution d’un système d’équations non-linéaires quadratiques à chaque pas d’intégration a été proposée par Fatunla[Fatu80].

1.5.3 Les méthodes de Runge-Kutta

Une méthode de Runge-Kutta à s étapes pour la propagation de la solution d’une équation (matricielle) de type

$$\frac{d}{dt}\Psi(t) = (-i)\mathbf{H}(t)\Psi(t), \quad (1.124)$$

de t_n à t_{n+1} est donnée par [Hue97] :

$$\Psi(t_{n+1}) = \Psi(t_n) - ih \sum_{j=1}^s b_j \mathbf{H}(t_j) \Psi(t_j), \quad (1.125)$$

$$\Psi(t_j) = \Psi(t_n) - ih \sum_{k=1}^s a_{jk} \mathbf{H}(t_k) \Psi(t_k), \quad j = 1, \dots, s. \quad (1.126)$$

b_j et a_{jk} sont les coefficients définissant la méthode de Runge–Kutta ; h est le pas temporel. $\Psi(t_j)$ est le vecteur d'état au temps t_j . On distingue trois classes de méthodes :

- Si dans (1.126) nous avons $a_{jk} = 0$ pour $k \geq j$; $k = 1, 2, \dots, s$; alors chaque $\Psi(t_j)$ se calcule explicitement à partir des $\Psi(t_k)$ évaluées précédemment et la méthode est appelée *méthode de Runge–Kutta explicite* (ERK).
- Si $a_{jk} \neq 0$ pour $k \geq j$, la méthode est implicite (IRK) et il est nécessaire de résoudre à chaque pas un système linéaire de dimension Ns pour les $\Psi(t_j)$, N étant la dimension de la base.
- Si $a_{jk} = 0$ pour $k > j$, la méthode est diagonalement implicite ou semi-implicite (DIRK). Il faut résoudre à chaque pas s systèmes linéaires de dimension N .

1.5.4 La méthode de Fatunla

La méthode de Fatunla, valable même pour des systèmes d'équations différentielles *raides*, a été proposée par Fatunla [Fatu80] en 1980. C'est une méthode explicite d'ordre 4. Fatunla a testé sa méthode sur des systèmes différentiels *raides* et/ou oscillant très rapidement, mais simples. L'efficacité de cette méthode pour des systèmes différentiels *raides* plus complexes a été prouvée par Madroño et Piroux [Madr08] qui l'ont appliquée sur l'atome d'hydrogène en interaction avec un champ laser.

Notions fondamentales

Considérons le système d'équations différentielles

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}) \quad , \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} \quad (1.127)$$

D'après la méthode de Fatunla, la solution $\mathbf{y}(x)$ de (1.132) sur l'intervalle $(x_n, x_{n+1} = x_n + h)$ peut être approximée par la fonction

$$\mathbf{F}(x) = (I - e^{\Omega_1 x}) \mathbf{a} - (I - e^{-\Omega_2 x}) \mathbf{b} + \mathbf{c} \quad (1.128)$$

où I est la matrice identité, $\Omega_i = \text{diag}(\Omega_{i,1}, \Omega_{i,2}, \dots, \Omega_{i,m})$, $i = 1, 2$, et $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ des vecteurs constants de longueur m . Dans l'hypothèse où $\mathbf{F}(x)$ coïncide avec $\mathbf{y}(x)$ en x_n et x_{n+1} , $\mathbf{F}'(x)$ avec $\mathbf{f}(x, \mathbf{y})$ en x_n , et $\mathbf{F}''(x)$ avec $\mathbf{f}'(x, \mathbf{y})$ en x_n , la solution $\mathbf{y}_{n+1} \equiv \mathbf{y}(x_{n+1})$ de l'équation (1.127) en x_{n+1} peut être exprimée en termes de $\mathbf{y}_n \equiv \mathbf{y}(x_n)$ par [Fatu80] :

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + R\mathbf{f}_n + S\mathbf{f}_n^{(1)} \quad , \quad (1.129)$$

avec $\mathbf{f}_n = \mathbf{f}(x_n, \mathbf{y}_n)$, $\mathbf{f}_n^{(1)} = \left. \frac{d\mathbf{f}}{dx} \right|_{x=x_n}$. R et S sont des matrices diagonales données par

$$R = \Omega_2 \Phi - \Omega_1 \Psi \quad , \quad S = \Phi + \Psi \quad (1.130)$$

où les matrices Φ et Ψ , diagonales, ont pour éléments diagonaux

$$\Phi_i = \frac{e^{\Omega_{1,i}h} - 1}{\Omega_{1,i}(\Omega_{1,i} + \Omega_{2,i})} \quad ; \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (1.131)$$

et

$$\Psi_i = \frac{e^{-\Omega_{2,i}h} - 1}{\Omega_{2,i}(\Omega_{1,i} + \Omega_{2,i})} \quad ; \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (1.132)$$

Dans le cas où $\Omega_{1,i} = 0$, l'application de la règle de l'Hospital à l'équation (1.131) conduit à

$$\Phi_i = \frac{h}{\Omega_{2,i}} \quad (1.133)$$

et lorsque $\Omega_{2,i} = 0$, l'application de la même règle à (1.132) donne

$$\Psi_i = -\frac{h}{\Omega_{1,i}} \quad (1.134)$$

Les éléments diagonaux des matrices de *raideur* Ω_1 et Ω_2 ont pour expressions [Fatu80, Madr08] :

$$\Omega_{1,i} = \frac{1}{2} \left[-D_i + \sqrt{D_i^2 + 4E_i} \right] \quad (1.135)$$

et

$$\Omega_{2,i} = \Omega_{1,i} + D_i, \quad (1.136)$$

où les composantes D_i et E_i des vecteurs $\vec{D}$ et $\vec{E}$ sont données, en termes des composantes des dérivées $\mathbf{f}_n^{(k)}$, $k = 0, 1, 2, 3$, de $\mathbf{f}(x, y)$ par :

$$D_i = \frac{f_{n,i} f_{n,i}^{(3)} - f_{n,i}^{(1)} f_{n,i}^{(2)}}{f_{n,i}^{(1)} f_{n,i}^{(1)} - f_{n,i} f_{n,i}^{(2)}}, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (1.137)$$

et

$$E_i = \frac{f_{n,i}^{(1)} f_{n,i}^{(3)} - f_{n,i}^{(2)} f_{n,i}^{(2)}}{f_{n,i}^{(1)} f_{n,i}^{(1)} - f_{n,i} f_{n,i}^{(2)}}, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (1.138)$$

L'erreur de troncature pour la formule d'intégration (1.129) est donnée par [Fatu80, Madr08] :

$$\begin{aligned} T_{n+1} = & \frac{h^5}{5!} \frac{1}{\Omega_1 + \Omega_2} \left[(\Omega_1 + \Omega_2) \mathbf{f}_n^{(4)} + (\Omega_2^4 - \Omega_1^4) \mathbf{f}_n^{(1)} \right. \\ & \left. - (\Omega_1^4 \Omega_2 + \Omega_1 \Omega_2^4) \mathbf{f}_n^{(0)} \right] + \mathcal{O}(h^6) \end{aligned} \quad (1.139)$$

ou bien

$$\begin{aligned} T_{n+1} = & \frac{h^5}{5!} \left[\mathbf{f}_n^{(4)} + (\Omega_2^3 - \Omega_2^2 \Omega_1 + \Omega_2 \Omega_1^2 - \Omega_1^3) \mathbf{f}_n^{(1)} \right. \\ & \left. - \Omega_1 \Omega_2 (\Omega_1^2 - \Omega_1 \Omega_2 + \Omega_2^2) \mathbf{f}_n^{(0)} \right] + \mathcal{O}(h^6) \end{aligned} \quad (1.140)$$

Les expressions (1.137) et (1.138) montrent que D_i et E_i peuvent diverger lorsque les ièmes composantes de deux dérivées successives $\left(f_{n,i}^{(0)} \text{ et } f_{n,i}^{(1)} \text{ ou } f_{n,i}^{(1)} \text{ et } f_{n,i}^{(2)} \right)$ s'annulent. Supposons, par exemple, que $f_{n,i}^{(0)} = 0$ et $|f_{n,i}^{(1)}| = \epsilon \approx 0$. Compte tenu des relations (1.132) à (1.138),

les paramètres de raideur $\Omega_{1,i}$ et $\Omega_{2,i}$ sont dans ce cas proportionnels à $\frac{1}{\epsilon}$. Leurs parties réelles sont donc très grandes en valeur absolue, ce qui conduit à des valeurs énormes pour Φ_i et/ou Ψ_i , à moins que h soit suffisamment petit. En effet, si $\Re(\Omega_{1,i})$ est un nombre positif énorme, l'équation (1.131) montre que l'amplitude de Φ_i devient extrêmement grande, sauf si $e^{\Re(\Omega_{1,i})h}$ est de l'ordre de $|\Omega_{1,i}(\Omega_{1,i} + \Omega_{2,i})|$. Mais alors, $e^{\Re(\Omega_{1,i})h} \approx |\Omega_{1,i}(\Omega_{1,i} + \Omega_{2,i})|$ équivaut à

$$h \approx \frac{1}{\Re(\Omega_{1,i})} \ln |\Omega_{1,i}(\Omega_{1,i} + \Omega_{2,i})| \quad (1.141)$$

Donc, il faut que h soit suffisamment petit si $\Re(\Omega_{1,i})$ est un nombre positif très grand. De la même façon, on peut montrer, à partir de la relation (1.132), que si $\Re(\Omega_{2,i})$ est un nombre négatif très grand en valeur absolue, il faut que

$$h \approx \frac{1}{\Re(\Omega_{2,i})} \ln |\Omega_{2,i}(\Omega_{1,i} + \Omega_{2,i})| \quad (1.142)$$

Le problème de la divergence de la méthode de Fatunla due à la présence des paramètres de raideur de très grande magnitude a été traité par Madroñero et Piraux dans [Madr08]. Au lieu d'ajuster le pas d'intégration h à partir des relations (1.141) et (1.142) en prenant une très petite valeur pour ce pas, ils proposent de ne pas tenir compte de la contribution de l'itération concernée, c'est-à-dire annuler les composantes diagonales des matrices R et S dans la formule d'intégration (1.129) qui se réduit alors à

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n ,$$

puis de calculer de nouveau les paramètres de raideur après une modification légère de la valeur de h .

Nous allons appliquer la méthode de Fatunla au modèle atomique susmentionné, en présence d'un champ laser. L'équation de Schrödinger dépendante du temps est :

$$i \frac{d}{dt} \Psi(x, t) = (H_0 + H_I(t)) \Psi(x, t) \quad (1.143)$$

dans les système d'unités atomique. Choisissons le champ électrique $\vec{E}$ tel que

$$\vec{E}(t) = E_0 \cos(\omega t) \vec{e}_x \quad (1.144)$$

Alors le hamiltonien d'interaction $H_I(t)$ est donné, en jauge longueur et dans le cadre de l'approximation dipolaire, par

$$H_I(t) = E_0 x \cos(\omega t) \quad (1.145)$$

La fonction d'onde totale $\Psi(x, t)$ peut être développée sur une base de fonctions Sturmienne $\left\{ \psi_k^1(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{k(k+1)}} P_k^1(\tanh(\alpha x)) \right\}$:

$$\Psi(x, t) = \sum_k w_k(t) \psi_k^1(x) \quad (1.146)$$

En vue d'obtenir les équations différentielles pour les amplitudes $w_k(t)$ et présenter le système ainsi obtenu sous une forme matricielle, nous multiplions l'équation de Schrödinger (1.143) par $\psi_l^1(x)$ puis nous intégrons de $-\infty$ à $+\infty$. Nous obtenons finalement l'équation matricielle suivante (annexe A) :

$$iS \frac{d\mathbf{w}}{dt} = \mathbf{H}_0 \mathbf{w} + \cos(\omega t) \mathbf{V} \mathbf{w} \quad (1.147)$$

où S désigne la matrice de recouvrement, $\mathbf{H}_0$ la matrice du Hamiltonien libre, $\mathbf{V}$ la partie indépendante du temps de la matrice du Hamiltonien d'interaction :

$$V_{lk} = E_0 \int_0^{+\infty} \psi_l^1(x) x \psi_k^1(x) dx \quad (1.148)$$

et

$$\mathbf{w}(t) = \begin{bmatrix} w_1(t) \\ w_2(t) \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (1.149)$$

La multiplication à gauche des deux membres de (1.147) par $-iS^{-1}$ conduit à l'équation matricielle

$$\frac{d\mathbf{w}}{dt} = \tilde{\mathbf{H}}_0 \mathbf{w} + \cos(\omega t) \tilde{\mathbf{V}} \mathbf{w} \equiv f(t, \mathbf{w}) \quad (1.150)$$

avec

$$\tilde{\mathbf{H}}_0 = -iS^{-1}\mathbf{H}_0, \quad \tilde{\mathbf{V}} = -iS^{-1}\mathbf{V} \quad (1.151)$$

Par suite, nous avons :

$$\mathbf{f}_n^{(0)} \equiv f(t_n, \mathbf{w}_n) = \tilde{\mathbf{H}}_0 \mathbf{w}_n + \cos(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} \mathbf{w}_n \quad (1.152)$$

$$\mathbf{f}_n^{(1)} \equiv \left. \frac{d\mathbf{f}^{(0)}}{dt} \right|_{t=t_n} = \left(\tilde{\mathbf{H}}_0 + \cos(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} \right) \mathbf{f}_n^{(0)} - \omega \sin(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} \mathbf{w}_n \quad (1.153)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_n^{(2)} \equiv \left. \frac{d\mathbf{f}^{(1)}}{dt} \right|_{t=t_n} &= \left(\tilde{\mathbf{H}}_0 + \cos(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} \right) \mathbf{f}_n^{(1)} - 2\omega \sin(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} \mathbf{f}_n^{(0)} \\ &\quad - \omega^2 \cos(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} \mathbf{w}_n \end{aligned} \quad (1.154)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_n^{(3)} \equiv \left. \frac{d\mathbf{f}^{(2)}}{dt} \right|_{t=t_n} &= \left(\tilde{\mathbf{H}}_0 + \cos(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} \right) \mathbf{f}_n^{(2)} - 3\omega \sin(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} \mathbf{f}_n^{(1)} \\ &\quad - 3\omega^2 \cos(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} \mathbf{f}_n^{(0)} + \omega^3 \sin(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} \mathbf{w}_n \end{aligned} \quad (1.155)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_n^{(4)} \equiv \left. \frac{d\mathbf{f}^{(3)}}{dt} \right|_{t=t_n} &= \left(\tilde{\mathbf{H}}_0 + \cos(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} \right) \mathbf{f}_n^{(3)} - 4\omega \sin(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} \mathbf{f}_n^{(2)} \mathbf{f}_n^{(1)} \\ &\quad - 6\omega^2 \cos(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} + 4\omega^3 \sin(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} \mathbf{f}_n^{(0)} \\ &\quad + \omega^4 \cos(\omega t_n) \tilde{\mathbf{V}} \mathbf{w}_n \end{aligned} \quad (1.156)$$

Notons que les vecteurs $\mathbf{f}_n^{(i)}$, $i = 0, 1, 2, 3, 4$, peuvent être calculés sans faire l'inversion de la matrice de recouvrement $\mathbf{S}$. En effet, nous tirons, à partir de l'équation (1.147) les expressions suivantes :

$$i\mathbf{S}\mathbf{f}_n^{(0)} = \mathbf{H}_0 \mathbf{w}_n + \cos(\omega t_n) \mathbf{V} \mathbf{w}_n \quad (1.157)$$

$$i\mathbf{S}\mathbf{f}_n^{(1)} = (\mathbf{H}_0 + \cos(\omega t_n) \mathbf{V}) \mathbf{f}_n^{(0)} - \omega \sin(\omega t_n) \mathbf{V} \mathbf{w}_n \quad (1.158)$$

$$\begin{aligned} i\mathbf{S}\mathbf{f}_n^{(2)} &= (\mathbf{H}_0 + \cos(\omega t_n) \mathbf{V}) \mathbf{f}_n^{(1)} - 2\omega \sin(\omega t_n) \mathbf{V} \mathbf{f}_n^{(0)} \\ &\quad - \omega^2 \cos(\omega t_n) \mathbf{V} \mathbf{w}_n \end{aligned} \quad (1.159)$$

$$\begin{aligned} i\mathbf{Sf}_n^{(3)} = & (\mathbf{H}_0 + \cos(\omega t_n)\mathbf{V})\mathbf{f}_n^{(2)} - 3\omega \sin(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(1)} \\ & - 3\omega^2 \cos(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(0)} + \omega^3 \sin(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{w}_n \end{aligned} \quad (1.160)$$

$$\begin{aligned} i\mathbf{Sf}_n^{(4)} = & (\mathbf{H}_0 + \cos(\omega t_n)\mathbf{V})\mathbf{f}_n^{(3)} - 4\omega \sin(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(2)} \\ & - 6\omega^2 \cos(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(1)} + 4\omega^3 \sin(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(0)} \\ & + \omega^4 \cos(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{w}_n \end{aligned} \quad (1.161)$$

Le membre de droite du système d'équations (1.157) (un vecteur) peut être calculé au début de chaque itération. Par conséquent, nous obtenons le vecteur $\mathbf{f}_n^{(0)}$ en résolvant le système (1.157) à l'aide des routines LAPACK. Nous injectons alors ce vecteur dans le membre de droite du système d'équations (1.158), puis nous calculons le vecteur $\mathbf{f}_n^{(1)}$ en résolvant ce système. Connaissant $\mathbf{f}_n^{(0)}$ et $\mathbf{f}_n^{(1)}$, nous pouvons calculer $\mathbf{f}_n^{(2)}$, et ainsi de suite.

Dans la jauge vitesse, les systèmes d'équations à résoudre pour avoir les vecteurs $\mathbf{f}_n^{(0)}$, $\mathbf{f}_n^{(1)}$, $\mathbf{f}_n^{(2)}$, $\mathbf{f}_n^{(3)}$ et $\mathbf{f}_n^{(4)}$, nécessaires pour l'implémentation de la méthode de Fatunla, sont :

$$i\mathbf{Sf}_n^{(0)} = \mathbf{H}_0\mathbf{w}_n - \sin(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{w}_n \quad (1.162)$$

$$i\mathbf{Sf}_n^{(1)} = (\mathbf{H}_0 - \sin(\omega t_n)\mathbf{V})\mathbf{f}_n^{(0)} - \omega \cos(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{w}_n \quad (1.163)$$

$$\begin{aligned} i\mathbf{Sf}_n^{(2)} = & (\mathbf{H}_0 - \sin(\omega t_n)\mathbf{V})\mathbf{f}_n^{(1)} - 2\omega \cos(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(0)} \\ & + \omega^2 \sin(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{w}_n \end{aligned} \quad (1.164)$$

$$\begin{aligned} i\mathbf{Sf}_n^{(3)} = & (\mathbf{H}_0 - \sin(\omega t_n)\mathbf{V})\mathbf{f}_n^{(2)} - 3\omega \cos(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(1)} \\ & + 3\omega^2 \sin(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(0)} + \omega^3 \cos(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{w}_n \end{aligned} \quad (1.165)$$

$$\begin{aligned} i\mathbf{Sf}_n^{(4)} = & (\mathbf{H}_0 - \sin(\omega t_n)\mathbf{V})\mathbf{f}_n^{(3)} - 4\omega \cos(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(2)} \\ & + 6\omega^2 \sin(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(1)} + 4\omega^3 \cos(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(0)} \\ & - \omega^4 \sin(\omega t_n)\mathbf{V}\mathbf{w}_n \end{aligned} \quad (1.166)$$

Cette fois-ci, les éléments de la matrice $\mathbf{V}$ sont définis par l'équation

$$V_{lk} = \frac{E_0 c}{\omega} i \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_l^1(x) \frac{d}{dx} \psi_k^1(x) dx \quad (1.167)$$

car si $E(t) = E_0 \cos(\omega t)$, nous avons

$$A(t) = -c \int_0^t E(\tau) d\tau = -\frac{E_0 c}{\omega} \sin(\omega t) \quad (1.168)$$

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

Les figures 1.14 à 1.17 montrent la probabilité de trouver le système dans son état fondamental au temps t pour diverses valeurs des paramètres du champ, du potentiel de Pöschl-Teller et de la méthode de Fatunla. Ces figures permettent de comparer la méthode de Fatunla avec celles de Runge-Kutta car elles contiennent aussi les courbes de $P(t) \equiv |\langle \Psi(t) | \Psi_0 \rangle|^2$ obtenues en propageant dans le temps la fonction d'onde du système à l'aide de l'algorithme de Runge-Kutta dans la base Sturmienne et dans celle atomique en représentation d'interaction. Comme nous nous y attendions, le temps de calcul est beaucoup plus grand dans la base Sturmienne que dans celle atomique. La raison est que travailler dans la base atomique conduit à une réduction de la "raideur" du problème.

Les figures 1.18 à 1.19 sont obtenues en utilisant le champ électrique défini par

$$\vec{E}(t) = E_0 f(t) \sin(\omega t) \vec{e}_x \quad (1.169)$$

avec

$$f(t) = \begin{cases} \frac{t}{2T} = \frac{\omega t}{4\pi} & ; & 0 \leq t < 2T \\ 1 & ; & 2T \leq t < 38T \\ -\frac{t}{2T} + 20 = -\frac{\omega t}{4\pi} + 20 & ; & 38 \leq t \leq 40T \end{cases} \quad (1.170)$$

Notons que dans ce cas, les dérivées nécessaires pour l'implémentation de la méthode de Fatunla sont calculées en résolvant les systèmes d'équations suivantes :

$$i\mathbf{Sf}_n^{(0)} = (\mathbf{H}_0 + g(t_n)\mathbf{V}) \mathbf{w}_n \quad (1.171)$$

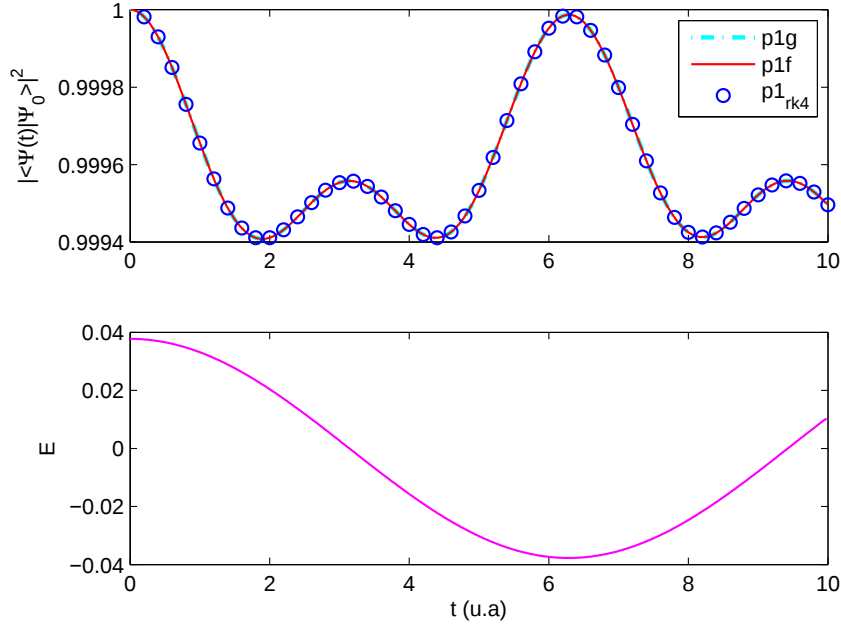


FIG. 1.14 – Evolution de la population de l'état fondamental (d'énergie $E_0 = -2.0 \text{ u.a.}$) dans le cas particulier où les paramètres du potentiel de Pöschl-Teller sont $U_0 = 3.0$, $\alpha = 1.0$. L'angle de rotation complexe $\theta = 0 \text{ rd}$ et la dimension de la base $n_{sturm} = 100$. Le champ électrique, cosinusoidal, a pour intensité maximale $I_{max} = 5 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ et pour fréquence angulaire $\omega = 0.5 \text{ u.a.}$ La courbe **p1f** représente les résultats obtenus dans la base sturmienne en utilisant la méthode de Fatunla pour propager la fonction d'onde totale dans le temps. La courbe **p1g** montre les résultats obtenus en utilisant la méthode de Runge-Kutta décrite dans [Lag99] pour propager, dans le temps, la fonction d'onde, en représentation d'interaction et dans la base atomique. La courbe **p1rk4** est obtenue en travaillant dans la base Sturmienne et en utilisant la routine **rk4** pour propager la fonction d'onde totale dans le temps. Nous avons travaillé dans la jauge longueur. Nous voyons que les trois méthodes conduisent aux mêmes résultats. Seulement, le temps de calcul n'est pas le même. Il est de l'ordre de 100 fois plus grand pour la courbe $p1_{rk4}$ que pour $p1g$. La raison est que la *raideur* du problème est plus prononcée dans la base Sturmienne que dans la base atomique. Nous avons trouvé que le temps de calcul est de l'ordre de 10 fois plus petit pour la courbe $p1f$ que pour $p1_{rk4}$, ce qui montre que la méthode de Fatunla est plus efficace que les méthodes de Runge-Kutta explicites pour des systèmes *raides*.

$$i\mathbf{Sf}_n^{(1)} = (\mathbf{H}_0 + g(t_n)\mathbf{V}) \mathbf{f}_n^{(0)} + g'(t_n)\mathbf{V}\mathbf{w}_n \quad (1.172)$$

$$i\mathbf{Sf}_n^{(2)} = (\mathbf{H}_0 + g(t_n)\mathbf{V}) \mathbf{f}_n^{(1)} + 2g'(t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(0)} + g''(t_n)\mathbf{V}\mathbf{w}_n \quad (1.173)$$

$$\begin{aligned} i\mathbf{Sf}_n^{(3)} = & (\mathbf{H}_0 + g(t_n)\mathbf{V}) \mathbf{f}_n^{(2)} + 3g'(t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(1)} + 3g''(t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(0)} \\ & + g^{(3)}(t_n)\mathbf{V}\mathbf{w}_n \end{aligned} \quad (1.174)$$

$$\begin{aligned} i\mathbf{Sf}_n^{(4)} = & (\mathbf{H}_0 + g(t_n)\mathbf{V}) \mathbf{f}_n^{(3)} + 4g'(t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(2)} + 6g''(t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(1)} \\ & + 4g^{(3)}(t_n)\mathbf{V}\mathbf{f}_n^{(0)} + g^{(4)}(t_n)\mathbf{V}\mathbf{w}_n \end{aligned} \quad (1.175)$$

avec

$$g(t) = \begin{cases} t \sin(\omega t) & ; & 0 \leq t < 2T \\ \sin(\omega t) & ; & 2T \leq t < 38T \\ \left(-\frac{\omega t}{4\pi} + 20\right) \sin(\omega t) & ; & 38 \leq t \leq 40T \end{cases} \quad (1.176)$$

dans la jauge longueur et

$$g(t) = \begin{cases} \sin(\omega t) - \omega t \cos(\omega t) & ; & 0 \leq t < 2T \\ \cos(\omega t) & ; & 2T \leq t < 38T \\ \omega t \cos(\omega t) - \sin(\omega t) - 80\pi \cos(\omega t) & ; & 38 \leq t \leq 40T \end{cases} \quad (1.177)$$

dans la jauge vitesse.

Les éléments de la matrice $\mathbf{V}$ sont quant à eux définis par

$$V_{lk} = \begin{cases} \frac{E_0\omega}{4\pi} \langle \psi_l^1 | x | \psi_k^1 \rangle & ; & 0 \leq t < 2T \\ E_0 \langle \psi_l^1 | x | \psi_k^1 \rangle & ; & 2T \leq t < 38T \\ E_0 \langle \psi_l^1 | x | \psi_k^1 \rangle & ; & 38 \leq t < 40T \end{cases} \quad (1.178)$$

dans la jauge longueur et

$$V_{lk} = \begin{cases} \frac{cE_0}{4\pi\omega} i \langle \psi_l^1 | \frac{d}{dx} | \psi_k^1 \rangle & ; \quad 0 \leq t < 2T \\ -\frac{cE_0}{\omega} i \langle \psi_l^1 | \frac{d}{dx} | \psi_k^1 \rangle & ; \quad 2T \leq t < 38T \\ \frac{cE_0}{4\pi\omega} i \langle \psi_l^1 | \frac{d}{dx} | \psi_k^1 \rangle & ; \quad 38 \leq t < 40T \end{cases} \quad (1.179)$$

dans la jauge vitesse.

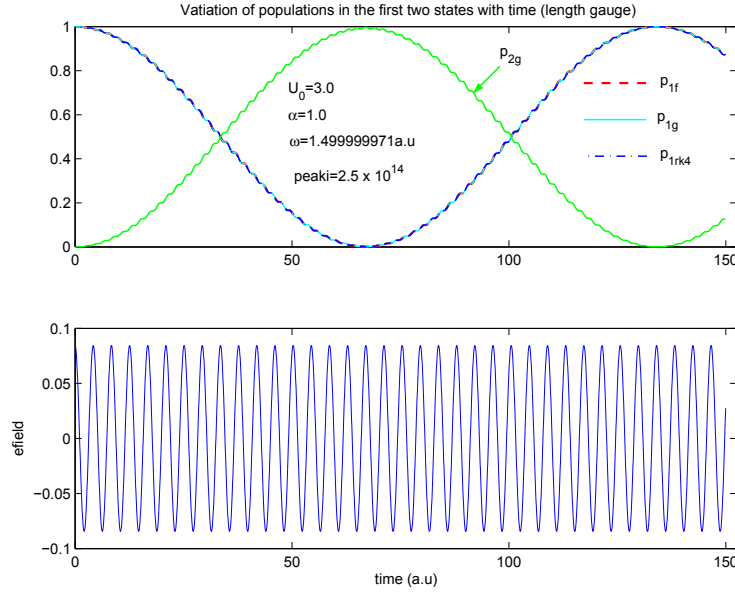


FIG. 1.15 – même chose que précédemment, à part que $peak_i \equiv I_{max} = 2.5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ et $\omega = 1.499999971 \text{ u.a}$ (fréquence de résonance entre les deux états liés du système, d'énergies $E_0 = -1.999999971 \text{ u.a}$ et $E_1 = -0.5 \text{ u.a}$). Nous avons aussi tracé la courbe p_{2g} qui montre la population dans l'état lié d'énergie E_1 calculée en procédant de la même façon que pour la courbe p_{1g} . Nous voyons que la population oscille entre les deux états liés du système (les oscillations de Rabi). La **période de Rabi** calculée à partir de cette figure coïncide avec celle théorique que nous trouvons à partir de la relation $T_R = \frac{2\pi}{\Omega_R}$, où la **fréquence de Rabi** Ω_R est définie par $\Omega_R = E_{max} |\langle E_0 | x | E_1 \rangle|$.

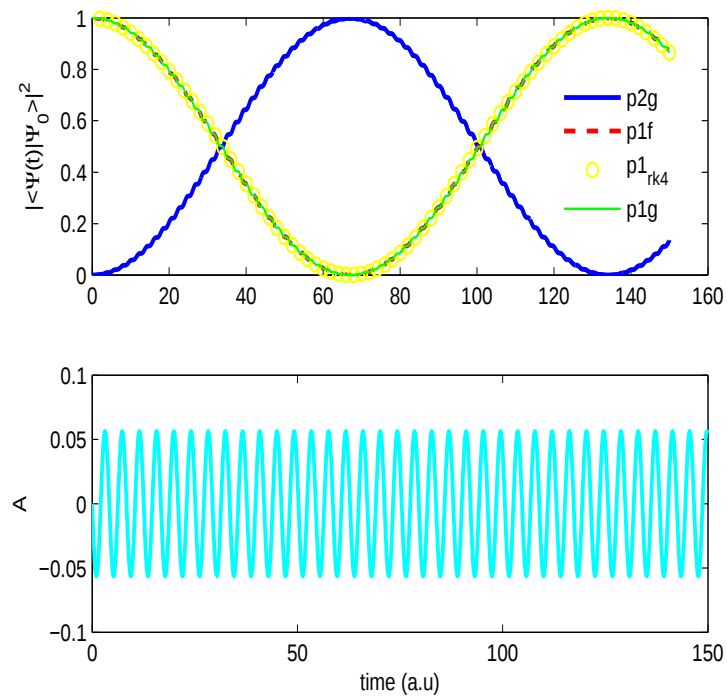


FIG. 1.16 – Même chose que précédemment, mais dans la jauge vitesse.

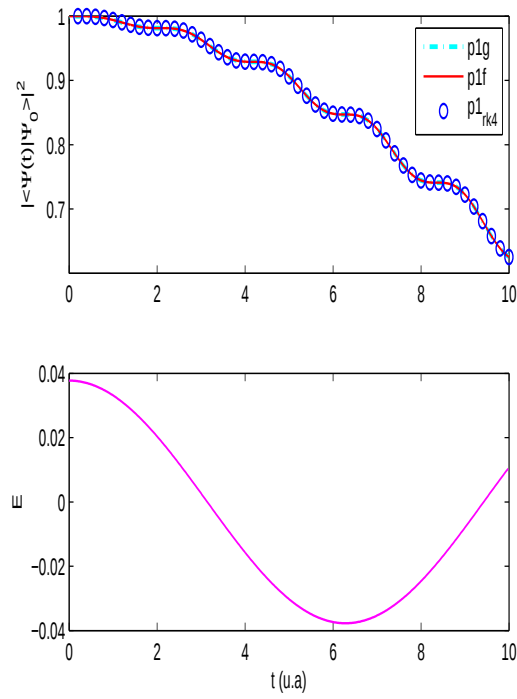


FIG. 1.17 – Même chose que pour la figure précédente, à part que $I_{max} = 2 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$ et $nsturm = 200$.

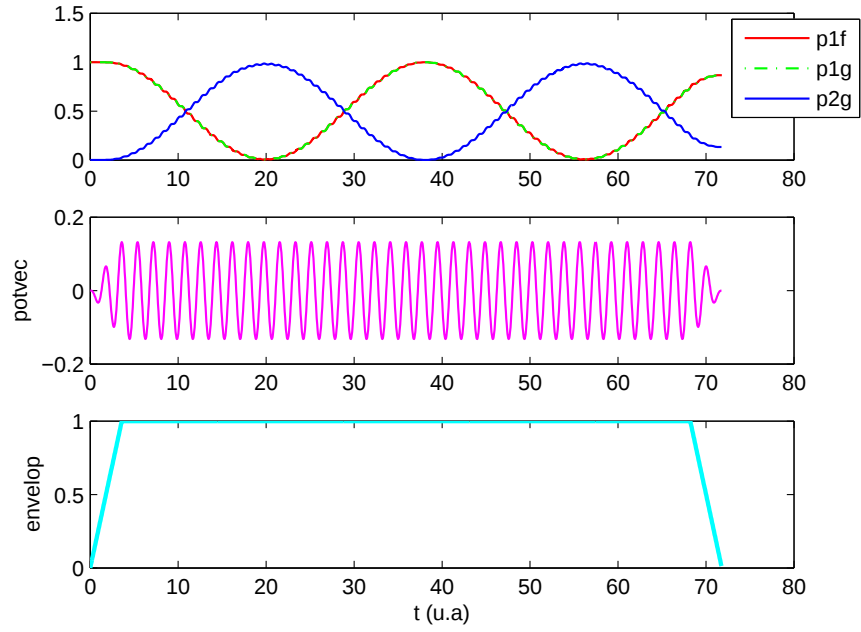


FIG. 1.18 – **En haut** : Evolution des population des deux premiers états liés (d'énergies $E_0 = -8.0$ u.a et $E_1 = -4.5$ u.a) lorsque $U_0 = 10.0$, $\alpha = 1.0$, $\theta = 0$ rd et la dimension de la base $nsturm = 200$. Le champ électrique, défini par les relations (1.169) et (1.170), a pour intensité maximale $I_{max} = 7.5 \times 10^{15}$ W/cm² et pour fréquence angulaire $\omega = 3.5$ u.a (fréquence de résonance entre l'état fondamental et le deuxième état lié). Nous avons travaillé dans la jauge vitesse. **Au milieu** : le potentiel vecteur. **En bas** : l'enveloppe du champ électrique.

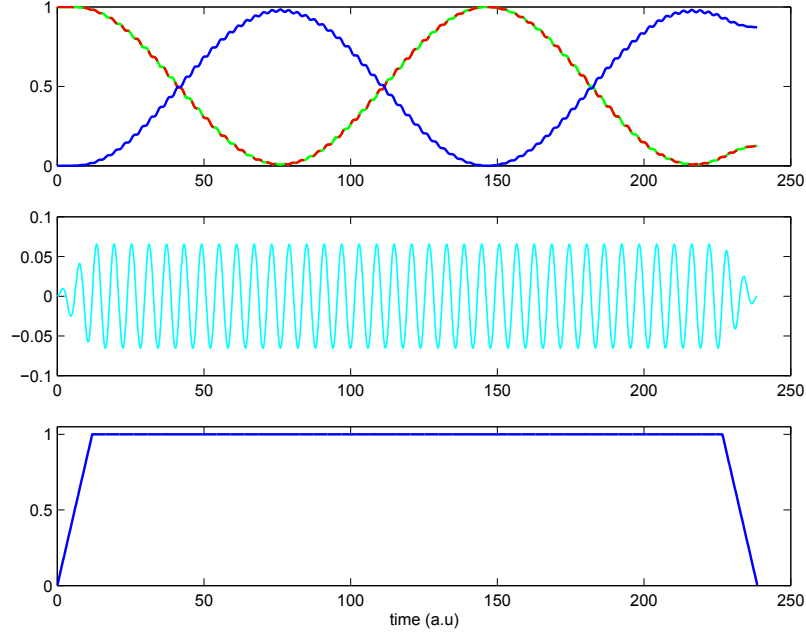


FIG. 1.19 – Même chose que précédemment, à part que nous avons travaillé dans la jauge longueur et que $U_0 = 3$, $\alpha = 0.55$, $n_{sturm} = 100$, $I_{max} = 1.5 \times 10^{14}$ et $\omega = 1.05318306$ (fréquence de résonance entre les deux premiers états liés du système, d'énergies $E_0 = -2.39778346 \text{ u.a}$ et $E_1 = -1.34460040 \text{ u.a}$). La courbe du milieu représente le champ électrique.

1.6 La méthode de Floquet

La méthode de Floquet [Pot92, Chu89, Dio76, Bay79] est une technique non perturbative puissante pour l'étude du comportement d'un système atomique ou moléculaire en présence d'un champ laser. Elle peut, par exemple, être utilisée pour calculer des taux d'ionisation multiphotonique pour des atomes ou molécules [Pot98, Bu95]. Mais cette méthode n'est valable que pour des champs périodiques dans le temps avec une enveloppe constante ou variant très lentement. Dans cette section, nous allons appliquer la méthode de Floquet au modèle atomique susmentionné pour étudier les états induits par laser [Light-induced States (LIS)]. Cette étude a déjà été faite par Yasuike T. et Someda K.

dans [Yas02] et par Stroe M. et Boca M. dans [Stro05] en utilisant la *méthode CSFGL* (Complex-scaling Fourier-grid Hamiltonian Method). La seule différence entre leur méthode et la nôtre réside dans le choix des fonctions de base pour les composantes harmoniques de la fonction de Floquet. Ils se sont servis de la *méthode des grilles* alors que nous, nous utilisons la *méthode spectrale* en décomposant chaque composante harmonique sur une base de fonctions Sturmienne appropriées. Nous choisissons le potentiel vecteur comme dans [Yas02] et [Stro05] :

$$\vec{A}(t) = \frac{cF}{\omega} \cos(\omega t) \vec{e}_x \quad (1.180)$$

où F représente l'amplitude du champ électrique, ω sa fréquence et c la vitesse de la lumière dans le vide. Nous nous plaçons dans le cadre de l'approximation dipolaire et nous travaillons dans la jauge vitesse. Le Hamiltonien d'interaction est dans ces conditions donné par la relation

$$H_V(t) = -i \left(\frac{F}{\omega} \cos(\omega t) \right) \frac{d}{dx} \quad (1.181)$$

L'ESDT est :

$$i \frac{d}{dt} \Psi(x, t) = (H_0 + H_V(t)) \Psi(x, t) \quad (1.182)$$

avec

$$H_0(t) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - U_0 \text{sech}^2(\alpha x)$$

Comme le champ électrique est périodique dans le temps, nous pouvons appliquer le *théorème de Floquet* sur $\Psi(x, t)$, la fonction d'onde totale du système : les solutions de l'équation de Schrödinger (1.182) peuvent être écrites sous la forme

$$\Psi(x, t) = e^{-i\mathcal{E}t} \Phi(x, t) \quad (1.183)$$

où la fonction de Floquet $\Phi(x, t)$ est périodique dans le temps et a même période que le champ, $\frac{2\pi}{\omega}$:

$$\Phi(x, t) = \Phi \left(x, t + \frac{2\pi}{\omega} \right) \quad (1.184)$$

En insérant (1.182) dans l'équation de Schrödinger (1.187), nous obtenons :

$$\left[H_0 + H_V(t) - i \frac{d}{dt} \right] \Phi(x, t) = \mathcal{E} \Phi(x, t) \quad (1.185)$$

Donc, $\Phi(x, t)$ est fonction propre du Hamiltonien de Floquet

$$\mathcal{H}_F \equiv \left[H_0 + H_V(t) - i \frac{d}{dt} \right] \quad (1.186)$$

Les éléments propres de Floquet, $\Phi(x, t)$ et $\mathcal{E}$, ont une structure périodique. Plus précisément, si $\Phi(x, t)$ est une fonction propre de l'opérateur de Floquet associée à la quasiénergie $\mathcal{E}$, alors la fonction $\Psi_n(x, t) \equiv e^{in\omega t} \Phi(x, t)$, avec $n \in \mathbb{N}$, est aussi une fonction propre de Floquet, associée à la quasiénergie $\mathcal{E} + n\omega$. Le spectre de $\mathcal{H}_F$ est donc invariant par rapport à une translation de $\hbar\omega$.

La fonction $\Phi(x, t)$, périodique dans le temps, peut être développée en série de Fourier comme suit :

$$\Phi(x, t) = \sum_{-\infty}^{+\infty} e^{-iN\omega t} \Phi_N(x) \quad (1.187)$$

On peut séparer le Hamiltonien d'interaction $H_V(t)$ en deux parties correspondant à l'absorption ou l'émission d'un photon :

$$\begin{aligned} H_V(t) &= -i \left[\frac{F}{\omega} \cos(\omega t) \right] \frac{d}{dx} = -i \frac{F}{2\omega} (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) \\ &= V_+ e^{-i\omega t} + V_- e^{i\omega t} \end{aligned} \quad (1.188)$$

avec

$$V_+ = V_- = -i \frac{F}{2\omega} \frac{d}{dx} \quad (1.189)$$

Substituons les équations (1.187) et (1.188) dans l'équation (1.185), puis multiplions à gauche le résultat trouvé par $\frac{\omega}{2\pi} e^{iN\omega t}$ et intégrons par rapport à t sur une période. Alors, nous obtenons :

$$(\mathcal{E} + N\omega - H_0) \Phi_N = V_+ \Phi_{N-1} + V_- \Phi_{N+1} \quad (1.190)$$

ou bien

$$(H_0 - N\omega) \Phi_N + V_+ \Phi_{N-1} + V_- \Phi_{N+1} = \mathcal{E} \Phi_N \quad (1.191)$$

Les composantes harmoniques $\Phi_N(x)$ sont développées sur une base discrète finie de fonctions Sturmienne associées au modèle atomique considéré :

$$\Phi_N(x) = \sum_{k=1}^{kmax} C_{Nk} \psi_k^1(x) = \sum_{k=1}^{kmax} C_{Nk} \sqrt{\frac{\alpha}{k(k+1)}} P_k^1(\tanh(\alpha x)) \quad (1.192)$$

Les quasiénergies $\mathcal{E}$ sont les valeurs propres du système d'équations linéaires homogènes en les coefficients C_{Nk} obtenues en projetant l'équation (1.190) sur les fonctions de la base. On multiplie (à gauche) cette équation par $\psi_l^1(x)$ et on intègre de $-\infty$ à $+\infty$. Désignant par $\mathbf{C}$ le vecteur colonne formé par les coefficients C_{Nk} , par $\mathbf{S}$ la matrice de recouvrement des fonctions de la base, et par $\mathcal{H}$ la matrice de Floquet, nous obtenons l'équation matricielle suivante :

$$\mathcal{H}\mathbf{C} = \mathcal{E}\mathbf{S}\mathbf{C} \quad (1.193)$$

Le vecteur $\mathbf{C}$, et par conséquent les matrices $\mathcal{H}$ et $\mathbf{S}$, sont partitionnés en blocs. Chaque bloc correspond à une composante harmonique donnée. La structure en blocs de la matrice de Floquet $\mathcal{H}$ est illustrée sur la figure 1.20. Les blocs diagonaux $\mathcal{H}^{(N)}$ sont des matrices carrées représentant l'opérateur $\mathcal{H}^{(N)} = H_0(x) - N\omega\mathbb{I}$, où $\mathbb{I}$ désigne l'opérateur identité et $N \in \mathbb{Z}$:

$$\mathcal{H}^{(N)} = \mathbf{H}_0 - N\omega\mathbf{S} \quad (1.194)$$

Notons que l'opérateur $\mathcal{H}^{(N)}$ ne couple que les états de même N , tandis que les opérateurs $V_{\pm}$ couplent les états tels que $\Delta N = \mp 1$. Ceci découle de l'équation (1.191). Donc, les règles de sélection pour N sont $\Delta N = 0, \pm 1$.

$\ddots$	N-2	N-1	N	N+1	N+2	N+3	
	$\mathcal{H}^{(N-2)}$	$\mathbf{V}_-$					N-2
	$\mathbf{V}_+$	$\mathcal{H}^{(N-1)}$	$\mathbf{V}_-$				N-1
		$\mathbf{V}_+$	$\mathcal{H}^{(N)}$	$\mathbf{V}_-$			N
			$\mathbf{V}_+$	$\mathcal{H}^{(N+1)}$	$\mathbf{V}_-$		N+1
				$\mathbf{V}_+$	$\mathcal{H}^{(N+2)}$	$\mathbf{V}_-$	N+2
					$\mathbf{V}_+$	$\mathcal{H}^{(N+3)}$	N+3
							$\ddots$

FIG. 1.20 – Schéma de la structure en blocs du Hamiltonien de Floquet

Pour déterminer les positions et les largeurs des résonances, nous appliquons la méthode de rotation complexe des coordonnées à notre système. Ainsi, l'équation matricielle (1.193) devient :

$$\mathcal{H}_\theta \mathbf{C} = \mathcal{E} \mathbf{S} \mathbf{C} \quad (1.195)$$

où $\mathcal{H}_\theta$ représente la matrice de Floquet tournée d'un angle θ . Ses blocs diagonaux $\mathcal{H}_\theta^{(N)}$ sont des matrices carrées représentant l'opérateur $\mathcal{H}_\theta^{(N)} = H_{0,\theta}(x) - N\omega\mathbb{I}$, où $H_{0,\theta}(x)$ désigne le Hamiltonien atomique tourné. Ses blocs non diagonaux sont reliés à ceux de la matrice $\mathcal{H}$ par les relations

$$\mathbf{V}_{+,\theta} = e^{-i\theta} \mathbf{V}_+ \quad (1.196)$$

et

$$\mathbf{V}_{-,\theta} = e^{-i\theta} \mathbf{V}_- \quad (1.197)$$

$\ddots$	N-2	N-1	N	N+1	N+2	N+3	
	$\mathcal{H}_\theta^{(N-2)}$	$\mathbf{V}_{,\theta-}$					N-2
	$\mathbf{V}_{+,\theta}$	$\mathcal{H}_\theta^{(N-1)}$	$\mathbf{V}_{-,\theta}$				N-1
		$\mathbf{V}_{+,\theta}$	$\mathcal{H}_\theta^{(N)}$	$\mathbf{V}_{-,\theta}$			N
			$\mathbf{V}_{+,\theta}$	$\mathcal{H}_\theta^{(N+1)}$	$\mathbf{V}_{-,\theta}$		N+1
				$\mathbf{V}_{+,\theta}$	$\mathcal{H}_\theta^{(N+2)}$	$\mathbf{V}_{-,\theta}$	N+2
					$\mathbf{V}_{+,\theta}$	$\mathcal{H}_\theta^{(N+3)}$	N+3
							$\ddots$

FIG. 1.21 – Schéma de la structure en blocs du Hamiltonien de Floquet tourné

Nous résolvons le problème aux valeurs propres (1.195) à l'aide des routines LAPACK. Les figures 1.22 à 1.24 montrent les spectres de $\mathcal{H}$ et $\mathcal{H}_\theta$ pour quelques valeurs des paramètres du potentiel de Pöschl-Teller, de l'angle de rotation complexe θ , de la dimension de la base n_{sturm} , de la fréquence (ω) et de l'amplitude (F) du champ électrique. Nous constatons que le spectre de $\mathcal{H}_\theta$ est invariant par rapport à une translation de $k\omega$, $k \in \mathbb{Z}$ et que les différentes coupures tournent vers le bas d'un angle égal à 2θ .

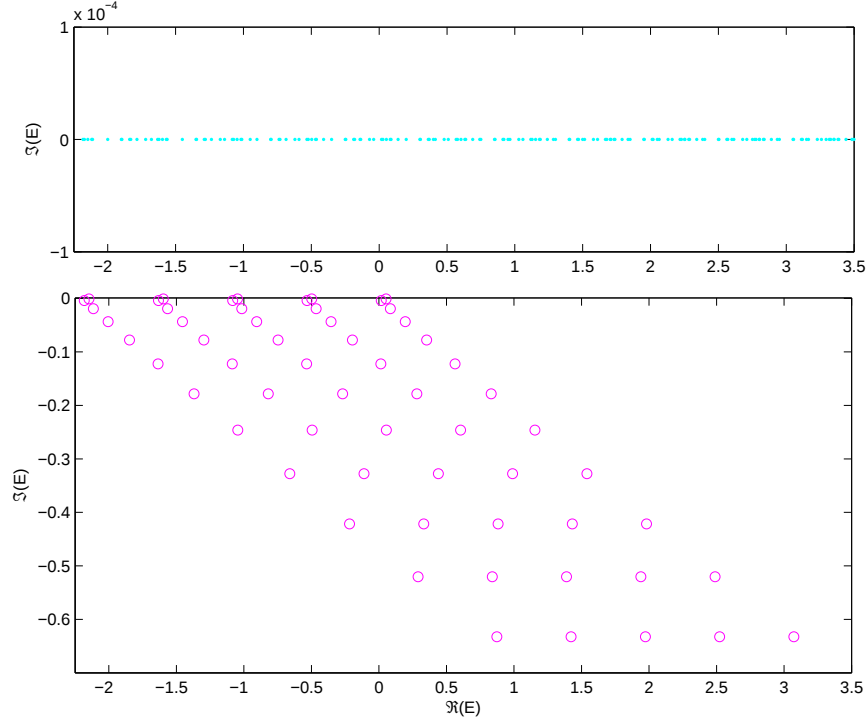


FIG. 1.22 – **En haut** : Spectre du Hamiltonien de Floquet non tourné. **En bas** : Spectre du Hamiltonien de Floquet tourné de $\theta = 0.1 \text{ rad}$. $U_0 = 1.0$, $\alpha = 1.0$, $n_{\text{sturm}} = 750$, $\alpha_0 \equiv \frac{F}{\omega^2} = 0.1$ et n_{ph} (le nombre de photons) varie de -10 à 10 (21 blocs de Floquet).

La figure 1.25 montre les trajectoires des pôles résonants dans le plan complexe des énergies pour $\omega = 0.55 \text{ u.a.}$ Nous constatons que la branche $\Phi_0^{(---)}$ (courbe à droite) prend origine en E_0 (énergie de l'état lié original). Quand à la branche $\Phi_0^{(--+)}$ (courbe à gauche), elle n'apparaît dans le secteur de résonance que pour des valeurs de $\alpha_0 \equiv \frac{F}{\omega^2}$ supérieures ou égales à 0.4. Elle est située en dehors de ce secteur pour $0 \leq \alpha_0 \leq 0.4$. Il s'agit donc d'un état induit par laser. Un tel état se caractérise par un pic intense dans le spectre du photoélectron [Yas02]. Notons que pour calculer les positions et les largeurs de ces résonances, nous diagonalisons plusieurs fois la matrice de Floquet tournée en utilisant des valeurs équidistantes pour le paramètre de rotation complexe θ . Les valeurs propres obtenues ne sont en général pas indépendantes

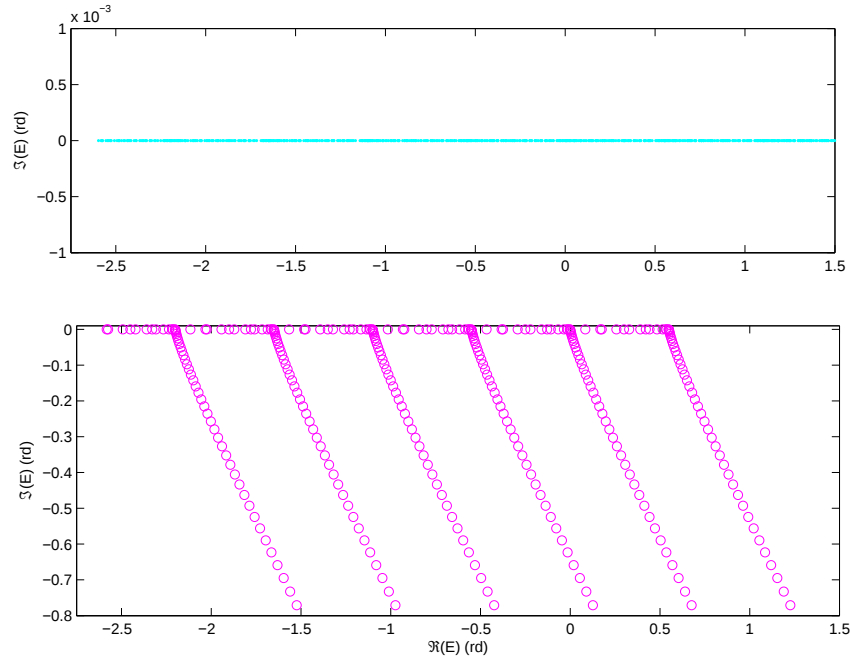


FIG. 1.23 – **En haut** : Spectre du Hamiltonien de Floquet non tourné. **En bas** : Spectre du Hamiltonien de Floquet tourné d'un angle $\theta = \frac{\pi}{8}$ rad. Les paramètres U_0 et α du potentiel de Pöschl-Teller valent 1.0 et 0.1 respectivement, $n_{sturm} = 650$, $\omega = 0.55$ u.a et n_{ph} varie de -9 à 9 (19 blocs de Floquet).

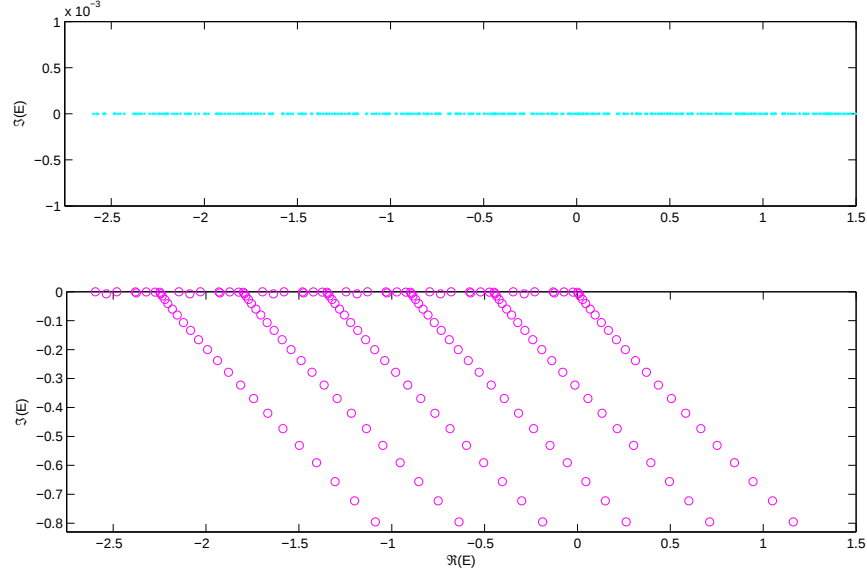


FIG. 1.24 – **En haut** : Spectre du Hamiltonien de Floquet non tourné. **En bas** : Spectre du Hamiltonien de Floquet tourné d'un angle $\theta = 0.275 \text{ rad}$. Les paramètres U_0 et α du potentiel de Pöschl-Teller valent 1.75 et 0.25 respectivement, $n_{\text{sturm}} = 650$, $\omega = 0.45 \text{ u.a}$ et n_{ph} varie de -9 à 9 (19 blocs de Floquet).

de θ . Elles se déplacent dans le plan complexe des énergies. Les valeurs propres complexes qui ne dépendent pas de l'angle de rotation complexe correspondent aux énergies des états résonants. En pratique, ces énergies dépendent de θ parce que la base sur laquelle nous développons la fonction d'onde doit être tronquée. D'où la nécessité de diagonaliser le Hamiltonien de Floquet tourné pour plusieurs valeurs de l'angle θ . Pour une valeur de l'amplitude du champ donnée, l'énergie de résonance E_{res} est celle associée à la valeur optimale du paramètre de rotation complexe θ_{opt} définie par la condition $\left. \frac{dE_{res}}{d\theta} \right|_{\theta=\theta_{opt}} \approx 0$.

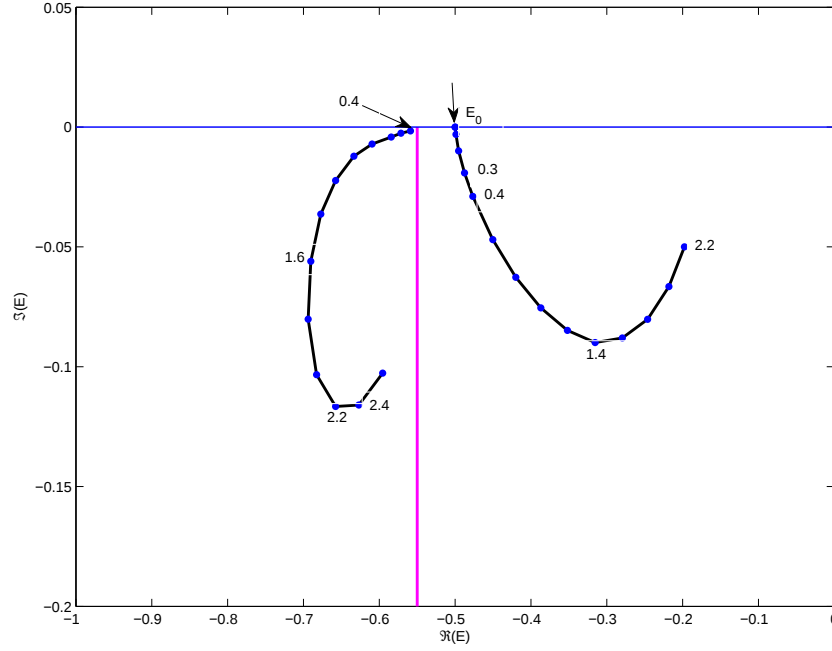


FIG. 1.25 – Trajectoires des pôles dans le plan complexe des énergies pour $\omega = 0.55 \text{ u.a.}$ Les lignes verticales en magenta représentent les coupures prenant origine aux seuils des voies de Floquet T_{-1} et T_0 situés en $E = -\omega$ et $E = 0$ respectivement. Les nombres indiqués devant certains points représentent les valeurs du paramètre $\alpha_0 \equiv \frac{F}{\omega^2}$. Notons que pour les valeurs de α_0 que nous avons considérées, nos résultats concordent avec ceux trouvés dans [Yas02] : l'état résonant $\Phi_0^{(---)}$ (courbe à droite) prend origine en $E_0 = -0.5 \text{ u.a.}$ (énergie de l'état lié original), tandis que l'état résonant $\Phi_0^{(--+)}$ (courbe à gauche) apparaît dans le secteur de résonance à partir de $\alpha_0 = 0.4$ et se trouve en dehors de ce secteur lorsque $0 \leq \alpha \leq 0.4$. $\Phi_0^{(--+)}$ est donc un état induit par laser.

Chapitre 2

Couplage d'un état lié à un continuum : Le modèle de Friedrichs-Fano tourné

2.1 Introduction

De nombreux processus d'interaction entre atomes et photons peuvent être analysés en termes de niveau discret couplé à un continuum. Une compréhension satisfaisante de ces processus ne peut être obtenue que si l'on maîtrise les caractéristiques essentielles des nouveaux états propres résultant du couplage entre l'état discret et le continuum.

Dans ce chapitre, nous analysons le problème d'un état lié couplé à un continuum en vue de calculer les résonances dans le cadre du modèle de Friedrichs-Fano [[Frie48](#), [Fan61](#), [Fuj08](#), [Koch97](#)] tourné. Nous commençons (section 2.2) par décrire ce modèle et les hypothèses simplificatrices qui consistent à prendre un seul état lié et un continuum résultant d'un problème unidimensionnel. La section 2.3 donne quelques indications sur la façon dont les résonances du modèle en question peuvent être calculées. Nous montrons que les énergies complexes des résonances peuvent être trouvées en résolvant une équation intégrale faisant intervenir les éléments de la matrice de couplage entre l'état lié et le continuum tournés. Pour rendre le calcul des résonances facile, nous réduisons cette équation intégrale à une équation algébrique en exprimant analytiquement l'intégrale définie qui y intervient. Les résonances à énergie réelle négative, qui correspondent à de nouveaux états liés

ayant un temps de vie infini, sont calculées de la même façon que précédemment en faisant tendre l'angle de rotation complexe vers 0. Les pôles associés à toutes ces résonances se déplacent dans le plan complexe des énergies si on change l'intensité du champ extérieur, ce qui revient à modifier le paramètre de couplage dans notre cas. La section 2.4 concerne le calcul des états propres du nouveau continuum. Dans la section 2.5, nous appliquons les résultats des sections précédentes au potentiel de Pöschl-Teller. Nous montrons que non seulement le modèle de Friedrichs-Fano tourné permet de calculer les résonances de manière simple, mais aussi de trouver les valeurs des parties principales de Cauchy qui interviennent dans le calcul de Fano[Fan61] en rapport avec le couplage d'un état lié à un continuum quand il n'y a pas de rotation complexe.

2.2 Le modèle de Friedrichs-Fano tourné

Le modèle de Friedrichs-Fano est un des modèles les plus simples pour décrire un processus de désintégration. Il consiste en un état discret couplé à un continuum d'états. L'une des hypothèses simplificatrices du modèle de Friedrichs-Fano est que l'on supprime le couplage continuum-continuum. Nous simplifions davantage ce modèle en prenant un état lié discret et un continuum d'états résultant d'un problème unidimensionnel. Nous supposons que le hamiltonien total du système peut être écrit sous la forme

$$H = H_0(x) + \varepsilon V \quad (2.1)$$

où ε représente le paramètre de couplage. Nous définissons le hamiltonien non perturbé H_0 par

$$H_0(x) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V_0(x). \quad (2.2)$$

Le potentiel $V_0(x)$ peut être défini de manière à ce que $H_0(x)$ admette un seul état lié. Mais le hamiltonien non perturbé possède en général plusieurs états liés. Dans ce cas, le modèle de Friedrichs-Fano s'obtient en extrayant de tous les états liés de $H_0(x)$ un seul que nous habillons avec un photon d'énergie suffisante pour le diluer dans le continuum, puis en supprimant le couplage continuum-continuum. Nous supposons, dans tous les cas, que $H_0(x)$ possède un spectre continu constitué de

valeurs propres positives E_0 et que les fonctions propres du continuum sont orthogonales :

$$H_0|\psi_{E_0}\rangle = E_0|\psi_{E_0}\rangle ; E_0 \geq 0 \text{ et } \langle\psi_{E_0}|\psi_{E'_0}\rangle = \delta(E_0 - E'_0) , \quad (2.3)$$

et un seul état lié $|\varphi_0\rangle$ dilué dans le continuum :

$$H_0|\varphi_0\rangle = \hbar\omega_0|\varphi_0\rangle , \quad \hbar\omega_0 > 0 \quad (2.4)$$

avec

$$\hbar\omega_0 = E_b + \hbar\omega , \quad (2.5)$$

E_b étant l'énergie de l'état lié choisi. Nous supposons en outre que

$$\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1 , \langle\varphi_0|\psi_{E_0}\rangle = 0 . \quad (2.6)$$

Dans ces conditions, le hamiltonien H_0 peut être écrit sous la forme suivante :

$$H_0 = \hbar\omega_0|\varphi_0\rangle\langle\varphi_0| + \int_0^{+\infty} dE_0 E_0|\psi_{E_0}\rangle\langle\psi_{E_0}| . \quad (2.7)$$

Pour avoir l'expression du hamiltonien total H , nous devons tenir compte de la perturbation εV :

$$\begin{aligned} H = & \hbar\omega_0|\varphi_0\rangle\langle\varphi_0| + \int_0^{+\infty} dE_0 E_0|\psi_{E_0}\rangle\langle\psi_{E_0}| \\ & + \varepsilon \int_0^{+\infty} dE_0 [v(E_0)|\psi_{E_0}\rangle\langle\varphi_0| + v(E_0)|\varphi_0\rangle\langle\psi_{E_0}|] \end{aligned} \quad (2.8)$$

où

$$v(E_0) \equiv \langle\varphi_0|V|\psi_{E_0}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \varphi_0^*(x) V(x) \psi_{E_0}(x) \quad (2.9)$$

Si nous introduisons la rotation complexe des coordonnées ($x \rightarrow x \exp(i\theta)$) dans l'équation (2.8), nous obtenons le *modèle de Friedrichs-Fano tourné* [Guerin]. Le Hamiltonien total H devient H_θ avec

$$H_\theta = U(\theta) H U^{-1}(\theta) = U(\theta) H_0 U^{-1}(\theta) + \varepsilon U(\theta) V U^{-1}(\theta) \quad (2.10)$$

où $U(\theta)$ représente l'opérateur de dilatation complexe. Comme nous l'avons vu dans le premier chapitre, l'action de cet opérateur sur les fonctions d'onde $\varphi_0(x)$ et $\psi_{E_0}(x)$ des états $|\varphi_0\rangle$ et $|\psi_{E_0}\rangle$ est définie par :

$$U(\theta)\varphi_0(x) \equiv \varphi_{0,\theta}(x) = e^{\frac{i}{2}\theta} \varphi_0(xe^{i\theta}) , \quad (2.11)$$

$$U(\theta)\psi_{E_0}(x) \equiv \psi_{E_{0,\theta}}(x) = e^{\frac{i}{2}\theta} \psi_{E_0}(xe^{i\theta}) \quad (2.12)$$

avec

$$E_{0,\theta} = E_0 e^{-2i\theta} . \quad (2.13)$$

Nous avons aussi

$$U(\theta)H_0(x)U^{-1}(\theta) \equiv H_{0,\theta}(x) = -\frac{1}{2}e^{-2i\theta} \frac{d^2}{dx^2} + V_0(xe^{i\theta}) \quad (2.14)$$

et

$$U(\theta)V(x)U^{-1}(\theta) \equiv V_\theta(x) = V(xe^{i\theta}) \quad (2.15)$$

Compte tenu des relations (2.11) à (2.13), nous avons[Guerin] :

$$\begin{aligned} H_\theta &= \hbar\omega_0|\varphi_{0,\theta}\rangle\langle\varphi_{0,-\theta}| + e^{-2i\theta} \int_0^{+\infty} dE_0 E_0 |\psi_{E_{0,\theta}}\rangle\langle\psi_{E_{0,-\theta}}| \\ &\quad + \varepsilon \int_0^{+\infty} dE_0 \left[v_{-\theta}(E_{0,-\theta}) |\psi_{E_{0,\theta}}\rangle\langle\varphi_{0,-\theta}| \right. \\ &\quad \left. + v_\theta(E_{0,\theta}) |\varphi_{0,\theta}\rangle\langle\psi_{E_{0,-\theta}}| \right] \end{aligned} \quad (2.16)$$

avec

$$\begin{aligned} v_\theta(E_{0,\theta}) &\equiv \langle\varphi_{0,-\theta}|V_\theta|\psi_{E_{0,\theta}}\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \varphi_{0,-\theta}^*(x) V(xe^{i\theta}) \psi_{E_{0,\theta}}(x) . \end{aligned} \quad (2.17)$$

2.3 Calcul des résonances

En l'absence de la dilatation complexe, le spectre du hamiltonien total H est en général continu. Nous supposons que

$$H|\Psi_H\rangle = E_H|\Psi_H\rangle, \quad \langle\Psi'_H|\Psi_H\rangle = \delta(E_H - E'_H). \quad (2.18)$$

La dilatation complexe du Hamiltonien H conduit à la découverte des résonances par les coupures (états du continuum) si le paramètre de rotation complexe θ est bien choisi. Les fonctions d'onde associées à ces résonances deviennent des fonctions de carré sommable. Soit E_{H_θ} une énergie de résonance dans le spectre du Hamiltonien tourné H_θ . Nous avons :

$$H_\theta|\Psi_{H_\theta}\rangle = E_{H_\theta}|\Psi_{H_\theta}\rangle \quad (2.19)$$

et

$$|\langle\Psi_{H_{-\theta}}|\Psi_{H_\theta}\rangle| < \infty$$

Nous développons l'état propre $|\Psi_{H_\theta}\rangle$ associé à cette résonance sur la base formée par les états propres de $H_{0,\theta}$:

$$|\Psi_{H_\theta}\rangle = a(\theta)|\varphi_{0,\theta}\rangle + \int_0^{+\infty} dE_0 b(E_{0,\theta})|\psi_{E_{0,\theta}}\rangle. \quad (2.20)$$

En insérant (2.20) dans les membres de gauche et de droite de l'équation (2.19), nous obtenons :

$$\begin{aligned} a(\theta)H_\theta|\varphi_{0,\theta}\rangle + \int_0^{+\infty} dE_0 b(E_{0,\theta})H_\theta|\psi_{E_{0,\theta}}\rangle &= E_{H_\theta}a(\theta)|\varphi_{0,\theta}\rangle \\ &+ E_{H_\theta} \int_0^{+\infty} dE_0 b(E_{0,\theta})|\psi_{E_{0,\theta}}\rangle. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Nous faisons agir $\langle\psi_{E'_{0,\theta}}|$ et $\langle\varphi_{0,\theta}|$ sur l'équation précédente et nous obtenons

$$\varepsilon a(\theta)v_{-\theta}^*(E'_{0,-\theta}) + E'_{0,\theta} b(E'_{0,\theta}) = E_{H_\theta} b(E'_{0,\theta}) \quad (2.22)$$

et

$$\hbar\omega_0 a(\theta) + \varepsilon \int_0^{+\infty} dE_0 b(E_{0,\theta}) v_\theta(E_{0,\theta}) = E_{H_\theta} \quad (2.23)$$

respectivement. A partir de l'équation (2.22), nous avons

$$b(E'_\theta) = \varepsilon \frac{a(\theta) v_{-\theta}^*(E'_{0,-\theta})}{E_{H_\theta} - E'_{0,\theta}}. \quad (2.24)$$

L'équation (2.23) donne :

$$(E_{H_\theta} - \hbar\omega_0) a(\theta) = \varepsilon \int_0^{+\infty} dE_0 b(E_{0,\theta}) v_\theta(E_{0,\theta}). \quad (2.25)$$

La substitution de (2.24) dans (2.25) conduit à :

$$(E_{H_\theta} - \hbar\omega_0) a(\theta) = \varepsilon^2 a(\theta) \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{v_{-\theta}^*(E_{0,-\theta}) v_\theta(E_{0,\theta})}{E_{H_\theta} - E_{0,\theta}}, \quad (2.26)$$

ou bien

$$E_{H_\theta} = \hbar\omega_0 + \varepsilon^2 \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{w_\theta(E_{0,\theta})}{E_{H_\theta} - E_0 e^{-2i\theta}} \quad (2.27)$$

avec

$$w_\theta(E_{0,\theta}) \equiv v_{-\theta}^*(E_{0,-\theta}) v_\theta(E_{0,\theta}). \quad (2.28)$$

Les énergies de résonance sont solutions de l'équation (2.27).

Intéressons-nous maintenant aux fonctions propres des résonances. L'insertion de (2.24) dans (2.20) donne :

$$|\Psi_{H_\theta}\rangle = a(\theta) \left[|\varphi_{0,\theta}\rangle + \varepsilon \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{v_{-\theta}^*(E_{0,-\theta})}{E_{H_\theta} - E_0 e^{-2i\theta}} |\psi_{E_{0,\theta}}\rangle \right]. \quad (2.29)$$

Nous choisissons la constante de normalisation $a(\theta)$ telle que

$$\langle \Psi_{H_\theta} | \Psi'_{H_\theta} \rangle = 1. \quad (2.30)$$

Mais alors,

$$\langle \Psi_{H-\theta} | \Psi'_{H_\theta} \rangle = a^*(-\theta) a'(\theta) \left[1 + \varepsilon^2 \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{v_\theta(E_{0,\theta})}{E_{H_\theta} - E_0 e^{-2i\theta}} \langle \psi_{E_{0,-\theta}} | \right. \\ \left. \int_0^{+\infty} dE'_0 \frac{v_{-\theta}^*(E'_{0,-\theta})}{E_{H_\theta} - E'_0 e^{-2i\theta}} | \psi_{E'_{0,\theta}} \rangle \right], \quad (2.31)$$

ou bien

$$\langle \Psi_{H-\theta} | \Psi'_{H_\theta} \rangle = a^*(-\theta) a'(\theta) \left[1 + \varepsilon^2 \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{v_\theta(E_{0,\theta})}{E_{H_\theta} - E_0 e^{-2i\theta}} \right. \\ \left. \int_0^{+\infty} dE'_0 \frac{v_{-\theta}^*(E'_{0,-\theta})}{E_{H_\theta} - E'_0 e^{-2i\theta}} \langle \psi_{E_{0,-\theta}} | \psi_{E'_{0,\theta}} \rangle \right], \quad (2.32)$$

ou encore

$$\langle \Psi_{H-\theta} | \Psi'_{H_\theta} \rangle = a^*(-\theta) a(\theta) \left[1 + \varepsilon^2 \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{v_\theta(E_{0,\theta}) v_{-\theta}^*(E_{0,-\theta})}{(E_{H_\theta} - E_0 e^{-2i\theta})^2} \delta(E_0 - E'_0) \right] \quad (2.33)$$

$$= a^*(-\theta) a(\theta) \left[1 + \varepsilon^2 \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{w_\theta(E_{0,\theta})}{(E_{H_\theta} - E_0 e^{-2i\theta})^2} \delta(E_0 - E'_0) \right] \quad (2.34)$$

D'où

$$a^*(-\theta) a(\theta) = \frac{1}{1 + \varepsilon^2 \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{w_\theta(E_{0,\theta})}{(E_{H_\theta} - E_0 e^{-2i\theta})^2}}. \quad (2.35)$$

La phase du coefficient a peut être choisie de façon que $a(-\theta) = a^*(\theta)$, auquel cas nous obtenons

$$a(\theta)^2 = \frac{1}{1 + \varepsilon^2 \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{w_\theta(E_{0,\theta})}{(E_{H_\theta} - E_0 e^{-2i\theta})^2}}. \quad (2.36)$$

Pour un nouvel état lié, la fonction d'onde est normalisée de telle sorte que

$$|a|^2 = \frac{1}{1 + \varepsilon^2 \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{|v(E_0)|^2}{(E_H - E_0)^2}}. \quad (2.37)$$

Son expression s'obtient à partir de la relation (2.29) en faisant tendre θ vers zéro :

$$|\Psi_{H_{0+}}\rangle = a(0^+) \left[|\varphi_0\rangle + \varepsilon \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{v^*(E_0)}{E_{H_{0+}} - E_0} |\psi_{E_0}\rangle \right]. \quad (2.38)$$

2.4 Fonctions propres du nouveau continuum

Le spectre du nouveau continuum tourné est tel que :

$$H_\theta |\Psi_{E_\theta}\rangle = E_\theta |\Psi_{E_\theta}\rangle = E e^{-2i\theta} |\Psi_{E_\theta}\rangle \quad (2.39)$$

Nous imposons que les états propres $|\Psi_{E_\theta}\rangle$ de H_θ vérifient la condition de normalisation

$$\langle \Psi_{E'_\theta} | \Psi_{E_\theta} \rangle = \delta(E - E') \quad (2.40)$$

et nous développons ces états sur la base des états propres de $H_{0,\theta}$:

$$|\Psi_{E_\theta}\rangle = A(E, \theta) |\varphi_{0,\theta}\rangle + \int_0^{+\infty} dE_0 B(E_0, E, \theta) |\psi_{E_{0,\theta}}\rangle. \quad (2.41)$$

Fano[Fan61] a calculé les coefficients A et B dans le cas particulier où $\theta = 0$, c'est-à-dire en l'absence de rotation complexe. Notons que dans ce cas l'équation précédente se réduit à

$$|\Psi_E\rangle = A(E) |\varphi_0\rangle + \int_0^{+\infty} dE_0 B(E_0, E) |\psi_{E_0}\rangle. \quad (2.42)$$

et la condition de normalisation (2.40) devient

$$\langle \Psi_{E'} | \Psi_E \rangle = \delta(E - E'). \quad (2.43)$$

En utilisant nos notations, nous pouvons présenter les résultats de Fano comme suit :

$$B(E_0, E) = \varepsilon A(E) V_{E_0} \left[\mathcal{P} \frac{1}{E - E_0} + z(E) \delta(E - E_0) \right] \quad (2.44)$$

avec

$$V_{E_0} = \langle \Psi_{E_0} | V | \varphi_{E_0} \rangle = v^*(E_0) \quad (2.45)$$

et

$$z(E) = \frac{E - \hbar\omega_0 - \mathcal{P} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{\varepsilon^2 |V_{E_0}|^2}{E - E_0}}{\varepsilon^2 |V_E|^2}. \quad (2.46)$$

L'équation (2.44) montre que $A(E)$ joue le rôle de coefficient de normalisation. Il vérifie la relation[Fan61]

$$|A(E)|^2 = \frac{1}{\varepsilon^2 |V_E|^2 [\pi^2 + z^2(E)]}. \quad (2.47)$$

Compte tenu de la condition de normalisation (2.40) lorsque le paramètre de dilatation complexe θ est différent de zéro, nous obtenons, à partir des relations (2.44) et (2.46) les expressions :

$$\begin{aligned} B(E_0, E, \theta) = & \varepsilon A(E, \theta) v_{-\theta}^*(E_0, -\theta) \left[\mathcal{P} \frac{e^{-2i\theta}}{E - E_0} \right. \\ & \left. + z(E e^{-2i\theta}) \delta(E - E_0) \right] \end{aligned} \quad (2.48)$$

et

$$\begin{aligned} z(E e^{-2i\theta}) = & \frac{E e^{-2i\theta} - \hbar\omega_0 - \mathcal{P} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{\varepsilon^2 v_{-\theta}^*(E_0, -\theta) v_\theta(E_0, \theta)}{(E - E_0) e^{-2i\theta}}}{\varepsilon^2 v_{-\theta}^*(E, -\theta) v_\theta(E, \theta)} \\ = & \frac{E e^{-2i\theta} - \hbar\omega_0 - \mathcal{P} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{\varepsilon^2 w_\theta(E_0, \theta)}{(E - E_0) e^{-2i\theta}}}{\varepsilon^2 w_\theta(E, \theta)}. \end{aligned} \quad (2.49)$$

La constante de normalisation $A(E, \theta)$ vérifie l'équation

$$\begin{aligned} A^*(E, -\theta) A(E, \theta) = & \frac{1}{\varepsilon^2 v_{-\theta}^*(E, -\theta) v_\theta(E, \theta) [e^{4i\pi} + z^2(E e^{-2i\theta})]} \\ = & \frac{1}{\varepsilon^2 w_\theta(E, \theta) [e^{4i\pi} + z^2(E e^{-2i\theta})]}. \end{aligned} \quad (2.50)$$

2.5 Application au potentiel de Pöschl-Teller habillé

Dans cette section, nous appliquons les résultats des sections précédentes au cas où $V_0(x)$ est donné par le potentiel de Pöschl-Teller,

$$V_0(x) = -U_0 \operatorname{sech}^2(\alpha x), \quad (2.51)$$

et le couplage $\varepsilon V(x)$ par la relation

$$\varepsilon V(x) = -\varepsilon x. \quad (2.52)$$

Nous choisissons la valeur 1 pour les paramètres du potentiel de Pöschl-Teller ($U_0 = \alpha = 1$) et nous travaillons dans le système d'unités atomique ($m_e = 1$ et $\hbar = 1$). Dans ces conditions, le Hamiltonien non perturbé

$$H_0(x) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \operatorname{sech}^2(x) \quad (2.53)$$

possède un seul état lié d'énergie $E_b = -0.5 \text{ u.a.}$ La fonction propre normalisée associée à cet état est donnée par

$$\varphi_b(x) = \frac{\sqrt{2}}{2} \operatorname{sech}(x). \quad (2.54)$$

Elle est paire. Les fonctions propres du continuum peuvent être écrites sous la forme

$$\psi_{E_0}(x) = nc(E_0) \operatorname{sech}^{\beta_0}(x) {}_2F_1(2 + \beta_0, -1 + \beta_0; 1 + \beta_0; u(x)), \quad (2.55)$$

avec

$$u(x) = \frac{\exp(-x)}{\exp(x) + \exp(-x)} = \frac{1}{2} (1 - \tanh(x)) \quad (2.56)$$

et

$$\beta_0 = \pm i\sqrt{2E_0} = \pm ik_0, \quad E_0 > 0. \quad (2.57)$$

$cn(E_0)$ est une constante de normalisation. Les équations (2.55) et (2.57) montrent que pour chaque valeur propre positive de $H_0(x)$, il

existe deux fonctions propres, l'une associée à $\beta_0 = ik_0$ et l'autre à $\beta_0 = -ik_0$. Dans la suite, les deux solutions seront notées $\psi_{E_{0+}}(x)$ et $\psi_{E_{0-}}(x)$:

$$\psi_{E_{0+}}(x) = \operatorname{sech}^{ik_0}(x) {}_2F_1(2 + ik_0, -1 + ik_0; 1 + ik_0; u(x)) , \quad (2.58)$$

$$\psi_{E_{0-}}(x) = \operatorname{sech}^{-ik_0}(x) {}_2F_1(2 - ik_0, -1 - ik_0; 1 - ik_0; u(x)) . \quad (2.59)$$

Notons que

$$\psi_{E_{0+}}(x) = \overline{\psi_{E_{0-}}(x)} . \quad (2.60)$$

Nous montrons, dans l'annexe 3, que les fonctions propres du continuum, normalisées de façon que

$$\langle \psi_{E_{0\pm}} | \psi_{E_{0\pm}} \rangle = \delta(k_0 - k'_0) \quad (2.61)$$

et

$$\langle \psi_{E_{0\pm}} | \psi_{E_{0\mp}} \rangle = \delta(k_0 + k'_0) = 0 \text{ (car } k_0 > 0, k'_0 > 0) \quad (2.62)$$

peuvent, dans notre cas, être écrites comme suit :

$$\psi_{E_{0+}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1 + k_0^2)}} (\tanh(x) - ik_0) e^{ik_0 x} , \quad (2.63)$$

$$\psi_{E_{0-}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1 + k_0^2)}} (\tanh(x) + ik_0) e^{-ik_0 x} . \quad (2.64)$$

Pour avoir le modèle de Friedrichs-Fano, nous fournissons assez d'énergie $\hbar\omega$ à l'état lié $|\varphi_b\rangle$ de manière à ce que celui-ci se dilue dans le continuum. De plus, comme la fonction d'onde de l'état lié est paire et le couplage impair, nous devons, pour chaque énergie propre $E_0 > 0$ du continuum de $H_0(x)$, construire une fonction propre impaire $\psi_{E_0}^I(x)$ à partir d'une combinaison linéaire des deux solutions $\psi_{E_{0+}}(x)$ et $\psi_{E_{0-}}(x)$ définies par les équations (2.63) et (2.64). Ce travail fait

l'objet de la section 2.4.1. Le modèle de Friedrichs-Fano consiste donc, dans notre cas, à un état discret pair $|\varphi_0\rangle$ couplé à un continuum d'états à fonctions d'ondes impaires par un couplage impair. L'état lié discret dilué dans le continuum $|\varphi_0\rangle$ vérifie l'équation

$$H_0|\varphi_0\rangle = \hbar\omega_0|\varphi_0\rangle, \quad (2.65)$$

avec

$$\hbar\omega_0 = E_b + \hbar\omega = -0.5 \text{ u.a} + \hbar\omega, \quad \hbar\omega_0 > 0. \quad (2.66)$$

Les états propres du continuum $|\psi_{E_0}^I\rangle$ sont tels que

$$H_0|\psi_{E_0}^I\rangle = E_0|\psi_{E_0}^I\rangle, \quad \langle\psi_{E_0}^I|\psi_{E_0'}^I\rangle = \delta(E_0 - E_0'), \quad \psi_{E_0}^I(-x) = -\psi_{E_0}^I(x), \quad E_0 > 0. \quad (2.67)$$

Les états $|\varphi_0\rangle$ et $|\psi_{E_0}^I\rangle$ vérifient la relation

$$\langle\varphi_0|\psi_{E_0}^I\rangle = 0. \quad (2.68)$$

Nous les utilisons pour calculer les éléments de la matrice $v(E_0)$ dans la section 2.5.2. Ces éléments sont indispensables pour la détermination des résonances (section 2.5.3) et pour le calcul des fonctions propres du continuum du Hamiltonien total

$$H(x) = H_0(x) + \varepsilon V(x) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \text{sech}^2(x) - \varepsilon x. \quad (2.69)$$

2.5.1 Les fonctions propres impaires du continuum

Nous posons

$$\psi_{E_0}^I(x) = C_+ \psi_{E_{0+}}(x) + C_- \psi_{E_{0-}}(x), \quad E_0 > 0 \quad (2.70)$$

et nous imposons la condition

$$\psi_{E_0}^I(-x) = -\psi_{E_0}^I(x). \quad (2.71)$$

C_+ et C_- sont des constantes à déterminer. La substitution de (2.70) dans (2.71) conduit à

$$C_+ \psi_{E_{0+}}(-x) + C_- \psi_{E_{0-}}(-x) = -C_+ \psi_{E_{0+}}(x) - C_- \psi_{E_{0-}}(x). \quad (2.72)$$

Par suite,

$$\frac{C_+}{C_-} = -\frac{\psi_{E_{0-}}(x) + \psi_{E_{0-}}(-x)}{\psi_{E_{0+}}(x) + \psi_{E_{0+}}(-x)}. \quad (2.73)$$

En combinant (2.63), (2.64) et (2.73), nous obtenons

$$\frac{C_+}{C_-} = -\frac{(\tanh(x) + ik_0)e^{-ik_0x} + (-\tanh(x) + ik_0)e^{ik_0x}}{(\tanh(x) - ik_0)e^{ik_0x} - (\tanh(x) + ik_0)e^{-ik_0x}} = 1. \quad (2.74)$$

Nous pouvons donc écrire $\psi_{E_0}^I(x)$ sous la forme

$$\psi_{E_0}^I(x) = c(E_0)[\psi_{E_{0+}}(x) + \psi_{E_{0-}}(x)], \quad (2.75)$$

ou bien

$$\psi_{E_0}^I(x) = c(E_0)[\overline{\psi_{E_{0-}}(x)} + \psi_{E_{0-}}(x)] = 2c(E_0)\Re(\psi_{E_{0-}}(x)) \quad (2.76)$$

Compte tenu de l'équation (2.64), la relation précédente donne :

$$\psi_{E_0}^I(x) = \frac{2c(E_0)}{\sqrt{2\pi(1+k_0^2)}}[k_0 \sin(k_0x) + \cos(k_0x) \tanh(x)]. \quad (2.77)$$

La constante de normalisation $c(E_0)$ est définie de manière à ce que les fonctions $\psi_{E_0}^I(x)$ vérifient la condition de normalisation

$$\langle \psi_{E_0}^I | \psi_{E'_0}^I \rangle = \delta(E_0 - E'_0). \quad (2.78)$$

En utilisant l'équation (2.76), nous obtenons :

$$\langle \psi_{E_0}^I | \psi_{E'_0}^I \rangle = c^*(E_0)c(E'_0)\langle \psi_{E_{0+}} + \psi_{E_{0-}} | \psi_{E'_{0+}} + \psi_{E'_{0-}} \rangle \quad (2.79)$$

$$= c^*(E_0)c(E'_0)[\langle \psi_{E_{0+}} | \psi_{E'_{0+}} \rangle + \langle \psi_{E_{0+}} | \psi_{E'_{0-}} \rangle + \langle \psi_{E_{0-}} | \psi_{E'_{0+}} \rangle + \langle \psi_{E_{0-}} | \psi_{E'_{0-}} \rangle]. \quad (2.80)$$

L'insertion de (2.61) et (2.62) dans (2.80) conduit à

$$\begin{aligned} \langle \psi_{E_0}^I | \psi_{E'_0}^I \rangle &= 2c^*(E_0)c(E'_0)\delta(k_0 - k'_0) \\ &= 2c^*(E_0)c(E'_0)\delta(\sqrt{2E_0} - \sqrt{2E'_0}). \end{aligned} \quad (2.81)$$

Cette équation peut être réécrite :

$$\begin{aligned}\langle \psi_{E_0}^I | \psi_{E'_0}^I \rangle &= 2c^*(E_0)c(E_0)\delta\left(\sqrt{2}(\sqrt{E_0} - \sqrt{E'_0})\right) \\ &= \frac{2}{\sqrt{2}}c^*(E_0)c(E_0)\delta(\sqrt{E_0} - \sqrt{E'_0})\end{aligned}\quad (2.82)$$

car $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$.

Compte tenu de la relation[Mer70]

$$\delta(\sqrt{E} - \sqrt{E'}) = 2\sqrt{E}\delta(E - E'), \quad (2.83)$$

nous obtenons, à partir de (2.82), l'équation

$$\langle \psi_{E_0}^I | \psi_{E'_0}^I \rangle = 2|c(E_0)|^2\sqrt{2E_0}\delta(E_0 - E'_0). \quad (2.84)$$

La constante $c(E_0)$ est donc définie par la relation

$$|c(E_0)| = \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{2E_0}}}. \quad (2.85)$$

Cette équation est équivalente à

$$c(E_0) = \frac{\exp(i\lambda_{E_0})}{\sqrt{2\sqrt{2E_0}}} = \frac{\exp(i\lambda_{E_0})}{\sqrt{2k_0}}, \quad (2.86)$$

où λ_{E_0} représente la phase de $c(E_0)$. Par suite, l'équation (2.77) devient :

$$\psi_{E_0}^I(x) = \frac{\exp(i\lambda_{E_0})}{\sqrt{\pi k_0(1+k_0^2)}} [k_0 \sin(k_0 x) + \cos(k_0 x) \tanh(x)]. \quad (2.87)$$

2.5.2 Calcul des éléments de la matrice de couplage non tournée

La matrice dont nous voulons calculer les éléments est

$$v(E_0) = \langle \varphi_0 | x | \psi_{E_0}^I \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_0^*(x) x \psi_{E_0}^I(x) dx. \quad (2.88)$$

La substitution de (2.54) et (2.87) dans (2.88) donne

$$v(E_0) = \frac{\sqrt{2} \exp(i\lambda_{E_0})}{2\sqrt{\pi k_0(1+k_0^2)}} [k_0 I_1(k_0) + I_2(k_0)] \quad (2.89)$$

avec

$$I_1(k_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} x \operatorname{sech}(x) \sin(k_0 x) dx, \quad (2.90)$$

$$I_2(k_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} x \operatorname{sech}(x) \tanh(x) \cos(k_0 x) dx. \quad (2.91)$$

L'expression de $I_1(k_0)$ peut être écrite sous la forme

$$I_1(k_0) = i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_0 x} x \operatorname{sech}(x) dx \quad (2.92)$$

$$= i^2 \frac{d}{dk_0} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_0 x} \operatorname{sech}(x) dx. \quad (2.93)$$

Pour passer de (2.92) à (2.93), nous avons utilisé une propriété de la transformée de Fourier,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ixy} x^n f(x) dx = i^n \frac{d^n}{dy^n} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ixy} f(x) dx. \quad (2.94)$$

Sachant que[Frit73]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ixy} \operatorname{sech}(x) dx = \pi \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2} y\right), \quad (2.95)$$

nous avons

$$I_1(k_0) = -\frac{d}{dk_0} \left(\pi \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2} k_0\right) \right) = \frac{\pi^2}{2} \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2} k_0\right) \tanh\left(\frac{\pi}{2} k_0\right). \quad (2.96)$$

Pour calculer l'intégrale $I_2(k_0)$, nous l'écrivons sous la forme

$$I_2(k_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_0 x} x \operatorname{sech}(x) \tanh(x) dx = i \frac{d}{dk_0} J(k_0) \quad (2.97)$$

où

$$J(k_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_0x} \operatorname{sech}(x) \tanh(x) dx. \quad (2.98)$$

Mais alors,

$$\operatorname{sech}(x) \tanh(x) = \frac{2}{e^x + e^{-x}} \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} = 2 \left[\frac{e^{-x}}{(1 + e^{-2x})^2} - \frac{e^{-3x}}{(1 + e^{-2x})^2} \right]. \quad (2.99)$$

D'où

$$J(k_0) = 2 \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ik_0x} \frac{e^{-x}}{(1 + e^{-2x})^2} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ik_0x} \frac{e^{-3x}}{(1 + e^{-2x})^2} \right\}, \quad (2.100)$$

ou bien

$$J(k_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-(\frac{1}{2} + \frac{k_0}{2}i)t}}{(1 + e^{-t})^2} dt - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-(\frac{3}{2} + \frac{k_0}{2}i)t}}{(1 + e^{-t})^2} dt, \quad (2.101)$$

où nous avons fait le changement de variable $t = 2x$.

Sachant que[[Gra07](#)]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\mu x}}{(1 + e^{-x})^\nu} = B(\mu, \nu - \mu) \equiv \frac{\Gamma(\mu)\Gamma(\nu - \mu)}{\Gamma(\nu)}, \quad [0 < \Re \mu < \Re \nu], \quad (2.102)$$

nous avons :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-(\frac{1}{2} + \frac{k_0}{2}i)t}}{(1 + e^{-t})^2} dt &= \frac{\Gamma(\frac{1}{2} + \frac{k_0}{2}i) \Gamma(\frac{3}{2} - \frac{k_0}{2}i)}{\Gamma(2)} \\ &= \left(\frac{1}{2} - \frac{k_0}{2}i\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{k_0}{2}i\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{k_0}{2}i\right) \\ &= \frac{\pi}{2} (1 - ik_0) \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2}k_0\right) \end{aligned} \quad (2.103)$$

car

$$\Gamma\left(\frac{1}{2} + iy\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} - iy\right) = \pi \operatorname{sech}(\pi y). \quad (2.104)$$

De la même façon, nous obtenons

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-(\frac{3}{2} + \frac{k_0}{2}i)t}}{(1 + e^{-t})^2} dt = \frac{\pi}{2}(1 + ik_0) \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2}k_0\right). \quad (2.105)$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned} J(k_0) &= \frac{\pi}{2}(1 - ik_0) \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2}k_0\right) - \frac{\pi}{2}(1 + ik_0) \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2}k_0\right) \\ &= -i\pi k_0 \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2}k_0\right) \end{aligned} \quad (2.106)$$

et donc

$$\begin{aligned} I_2(k_0) &= i(-i)\pi \frac{d}{dk_0} \left[k_0 \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2}k_0\right) \right] = \pi \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2}k_0\right) \\ &\quad - \frac{\pi^2}{2} k_0 \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2}k_0\right) \tanh\left(\frac{\pi}{2}k_0\right). \end{aligned} \quad (2.107)$$

En insérant (2.96) et (2.107) dans (2.89), nous obtenons :

$$\begin{aligned} v(E_0) &= \frac{\sqrt{2} \exp(i\lambda_{E_0})}{2\sqrt{\pi k_0(1 + k_0^2)}} \pi \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2}k_0\right) \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2k_0(1 + k_0^2)}} e^{i\lambda_{E_0}} \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2}k_0\right), \end{aligned} \quad (2.108)$$

$$|v(E_0)| = \sqrt{\frac{\pi}{2k_0(1 + k_0^2)}} \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2}k_0\right). \quad (2.109)$$

Nous allons comparer ce résultat avec le résultat numérique ($|v(E_0)|_{num}$) que nous trouvons en utilisant les fonctions propres $\varphi_0(x)$ et $\psi_{E_0}^I(x)$ obtenues à l'issue d'une diagonalisation du hamiltonien libre $H_0(x)$ sur la base discrète périodique $\left\{ \phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{b-a}} e^{ik_n x} ; k_n = 2\pi \frac{n-1-\frac{N}{2}}{b-a}, n = 1, 2, \dots, N \right\}$ dans une boîte finie (un segment de droite d'extrémités a et b dans notre cas). Nous devons évidemment tenir compte de la densité d'états $\rho(E_0)$ du continuum dans la boîte où celui-ci est discrétisé. On montre [Corm94] que :

$$\rho(E_0) \approx \frac{1}{\pi\sqrt{2}} \frac{R_{max}}{\sqrt{E_0}}, \quad (2.110)$$

où R_{max} représente la taille de la boîte (b dans notre cas).

Les figures (2.1) à (2.4) montrent que si la dimension de la boîte est suffisamment grande, les quantités $|v(E_0)|$ et $|v(E_0)|_{num}$ sont liées par la relation

$$|v(E_0)|_{num} = \frac{1}{\sqrt{\rho(E_0)}} |v(E_0)| = \frac{\pi}{\sqrt{2b}} \frac{\text{sech}\left(\frac{\pi}{2}k_0\right)}{\sqrt{1+k_0^2}}. \quad (2.111)$$

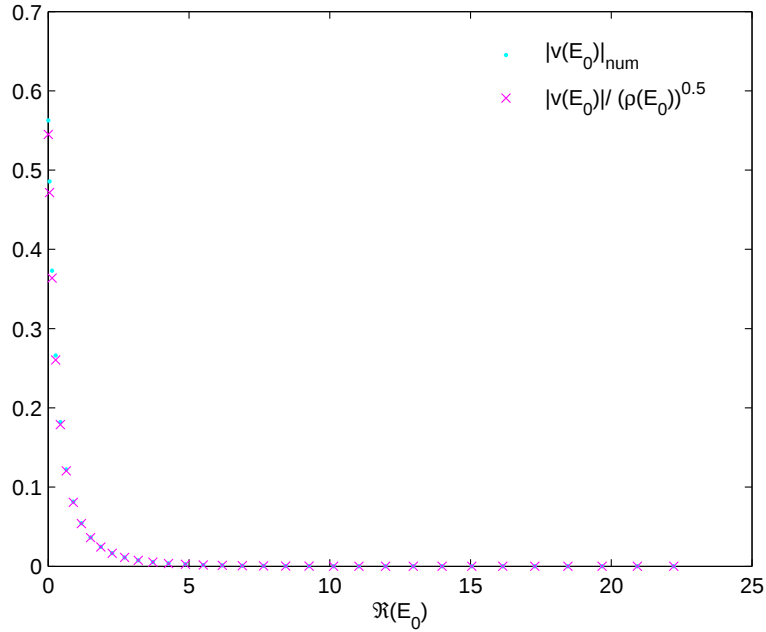


FIG. 2.1 – Graphes de $|v(E_0)|_{num}$ et $\frac{1}{\sqrt{\rho(E_0)}}|v(E_0)|$. Nous avons pris un segment de droite d'extrémités $a=-16$, $b=16$ et la base discrète est constituée de 1024 fonctions . Nous remarquons que ces deux graphes sont très proches, sauf pour les petites valeurs de l'énergie.

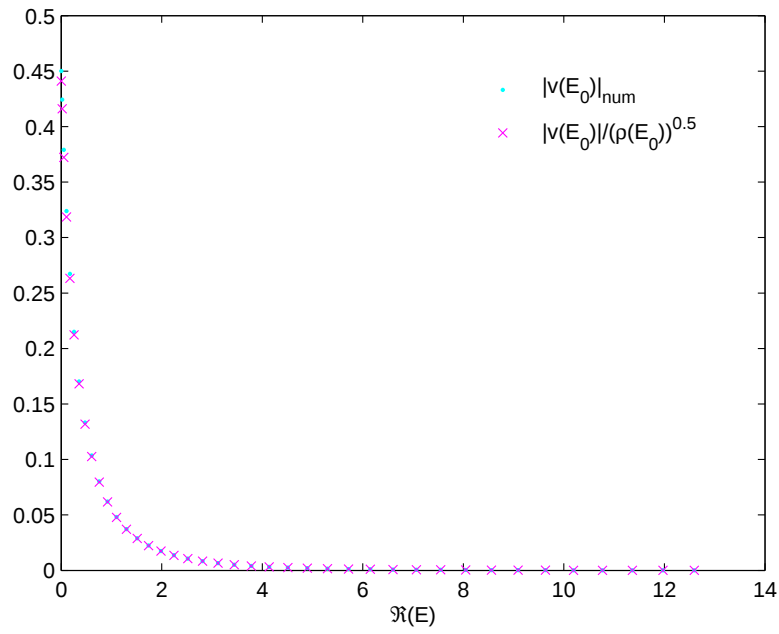


FIG. 2.2 – Graphes de $|v(E_0)|_{num}$ et $\frac{1}{\sqrt{\rho(E_0)}}|v(E_0)|$. $a=-25$, $b=25$ et la base discrète est constituée de 1600 fonctions.

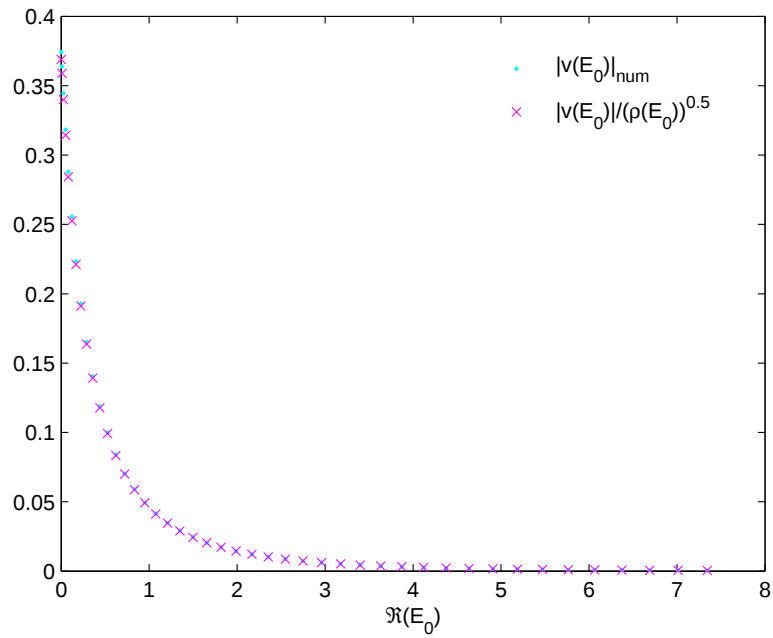


FIG. 2.3 – Graphes de $|v(E_0)|_{num}$ et $\frac{1}{\sqrt{\rho(E_0)}}|v(E_0)|$. $a=-36$, $b=36$ et la base discrète compend 2304 fonctions.

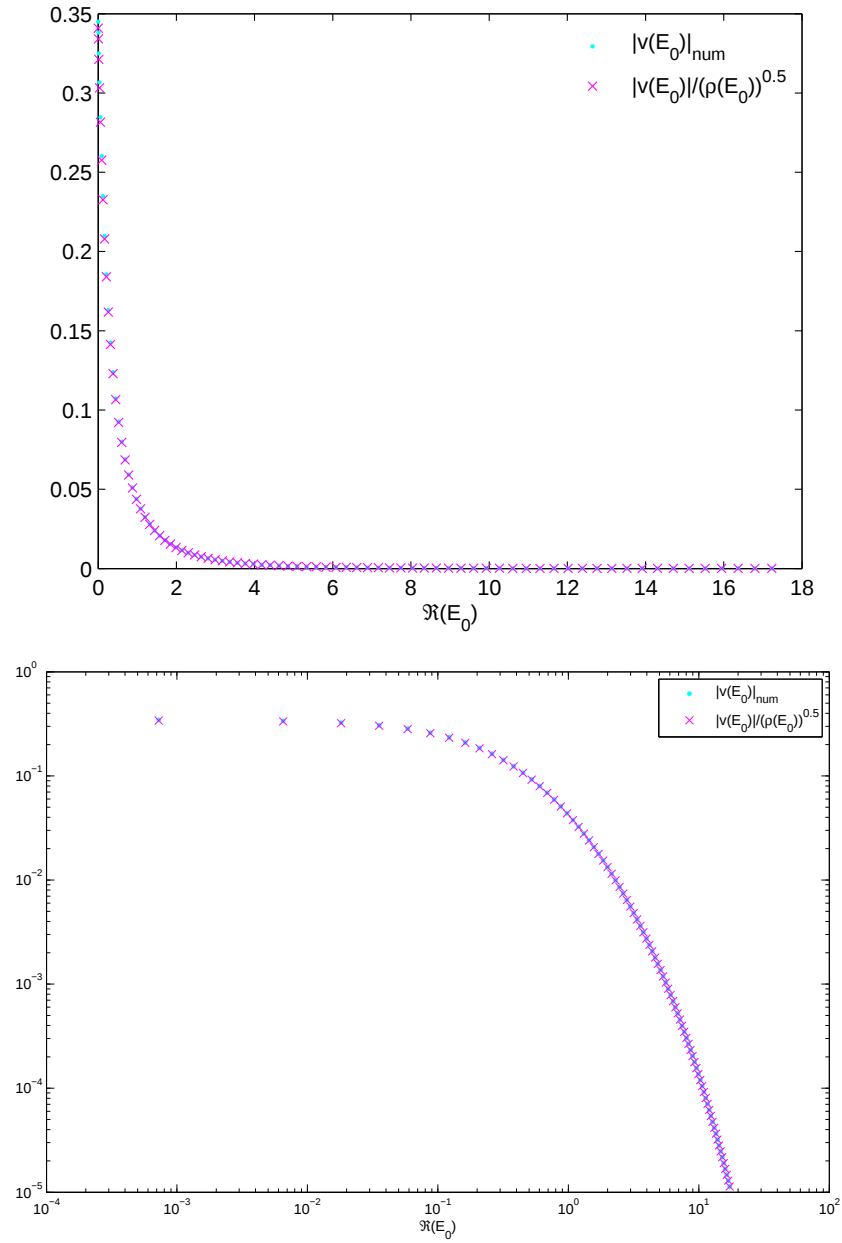


FIG. 2.4 – Graphes de $|v(E_0)|_{num}$ et $\frac{1}{\sqrt{\rho(E_0)}}|v(E_0)|$. $a=-42.25$, $b=42.25$ et la base discrète est constituée de 2704 fonctions. Nous avons utilisé l'échelle linéaire pour le premier graphe et l'échelle logarithmique pour le second graphe. Ce dernier permet de bien visualiser le comportement du couplage quand l'énergie augmente.

Notons que l'expression (2.87) des fonctions propres impaires du continuum devient

$$\psi_{E_0}^I(x) = \frac{\exp(i\lambda_{E_0})}{\sqrt{b(1+k_0^2)}} [k_0 \sin(k_0 x) + \cos(k_0 x) \tanh(x)] . \quad (2.112)$$

si nous tenons compte de la densité d'états du continuum discrétisé. En choisissant la phase de façon que

$$\lambda_{E_0} = \arg(1 + ik_0) - k_0 \ln(2) , \quad (2.113)$$

nous obtenons des fonctions équivalentes à celles calculées numériquement à une phase près qui dépend de l'énergie comme le montre le tableau 2.1. Ce choix de phase pour les fonctions $\psi_{E_0}^I(x)$ est motivé par le fait que si nous partons des expressions (2.58) et (2.59) de $\psi_{E_{0+}}(x)$ et $\psi_{E_{0-}}(x)$ pour calculer $\psi_{E_0}^I(x)$, nous trouvons

$$\psi_{E_0}^I(x) = nc(E_0) \frac{2}{1 - ik_0} e^{-ik_0 \ln(2)} [k_0 \sin(k_0 x) + \cos(k_0 x) \tanh(x)] , \quad (2.114)$$

ou bien

$$\begin{aligned} \psi_{E_0}^I(x) = & nc(E_0) \frac{2}{\sqrt{1+k_0^2}} e^{i \arg(1+ik_0)} e^{-ik_0 \ln(2)} [k_0 \sin(k_0 x) \\ & + \cos(k_0 x) \tanh(x)] . \end{aligned} \quad (2.115)$$

où $nc(E_0)$ représente une constante de normalisation que nous supposons réelle. Pour les calculs ultérieurs, nous prenons $b = 36$ et nous définissons les fonctions propres du continuum par

$$\psi_{E_0}^I(x) = \frac{e^{i(\arg(1+ik_0) - k_0 \ln(2))}}{\sqrt{b(1+k_0^2)}} [k_0 \sin(k_0 x) + \cos(k_0 x) \tanh(x)] . \quad (2.116)$$

Ces fonctions sont liées à celles calculées numériquement par la relation

$$\psi_{E_0}^{I,num}(x) = e^{i\eta(E_0)} \psi_{E_0}^I(x) . \quad (2.117)$$

Le tableau 2.1 contient les valeurs de $\eta(E_0)$ pour quelques énergies du continuum, et les figures 2.5 à 2.8 les graphes de $\psi_{E_0}^{I,num}(x)$ et $e^{i\eta(E_0)} \psi_{E_0}^I(x)$.

E_0 (u.a)	$\eta(E_0)$ (rd)
0.0054804604608	3.1074074455018
0.0491449607748	-1.0506496423486
0.135661868869	-2.7682763916761
0.26389473292	1.7977680746643
0.432829661598	1.4352024292060
0.641730246868	0.35598637361740
0.890109596558	-0.80620225973178
1.1776566252469	2.0981149976593
1.504173188473895	0.19338178322106
1.8695315314899	-2.9011287023064
2.2736477026996	-2.8433239075722
2.716465338207	0.38006830993662
3.197945765659	-2.7035845636644
3.7180618909524	-2.7436081954059
4.27679435576779	0.83200132001418
4.874129075207	0.073365104114579
5.51005562838164	-2.1229544291525
6.1845661859976	-1.9579962261792
6.897654782469	1.8393842664022
7.649316813209	1.4226713683979
8.43954868174	-1.2651769803754
9.2683475481719	-1.4890985585975
10.13571147374	-1.3699367144978
11.041637655804	1.9484808690375
11.986125592732	2.0223073294344
12.9691737461751	-1.736373982605
13.9907811167328	2.2378477427616
15.050946874591	-0.74925321517913
16.14967032628	-0.16187948256139
17.28695088879	2.5687829245425
18.46278806915	-0.33992831591901
19.67718144836556	-0.20047975126236
20.9301306684846	-0.066629741539332
22.2216354222915	0.75938270530312

TAB. 2.1 – Colonne de gauche : les premières valeurs propres du continuum calculées numériquement avec une grille de 1024 points. Colonne de droite : les valeurs correspondantes de $\eta(E_0)$.

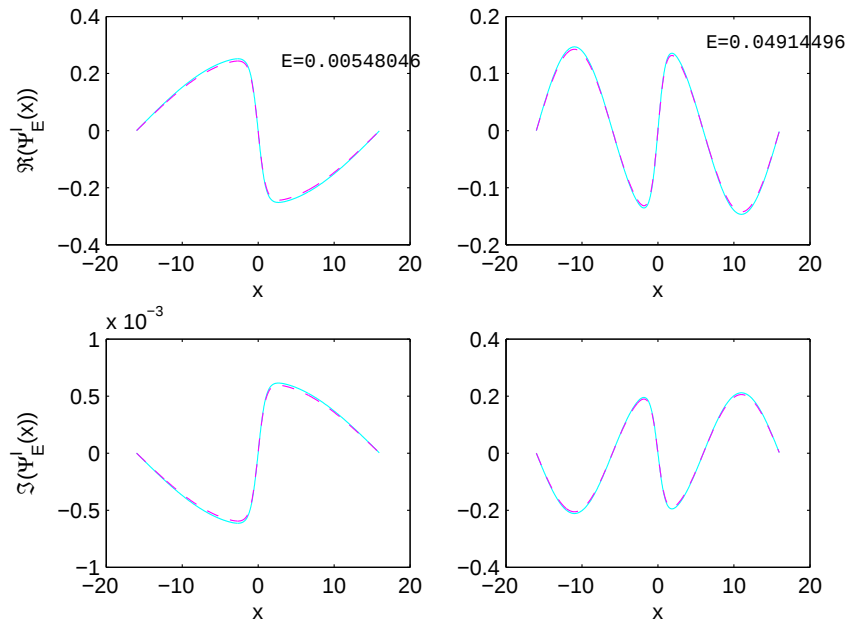


FIG. 2.5 – Graphes des parties réelle et imaginaire de la fonction propre impaire du continuum pour $E_0 = 0.0054046$ u.a et $E_0 = 0.04914496$ u.a. En magenta : la fonction $e^{i\eta(E_0)}\Psi_{E_0}^I(x)$, où $\Psi_{E_0}^I(x)$ est donnée par l'équation (2.116) . En cyan : la fonction $\Psi_{E_0}^{I,num}(x)$.

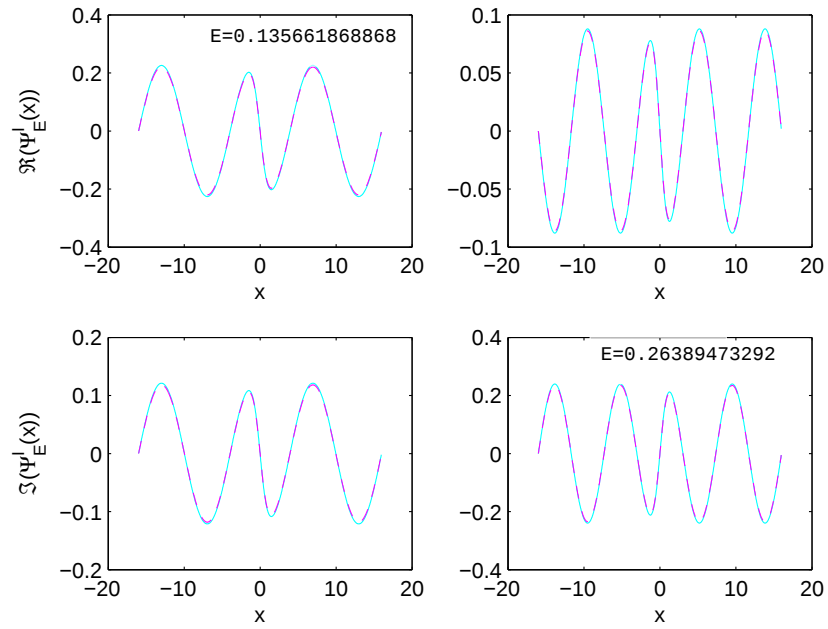


FIG. 2.6 – Même chose que pour la figure 2.5, mais avec $E=0.135661868868$ u.a et $E=0.26389473292$ u.a

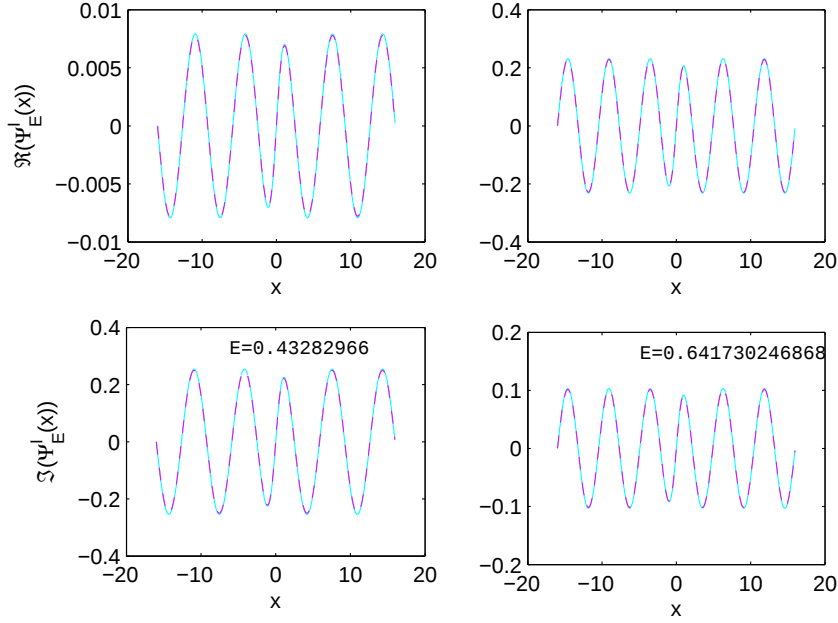


FIG. 2.7 – Même chose que précédemment, mais avec $E_0=0.43282966$ u.a et $E_0=0.641730246868$ u.a

2.5.3 Calcul des résonances

Comme nous l'avons vu dans la section 2.3, les énergies de résonance sont solutions de l'équation (2.27),

$$E_H = \hbar\omega_0 + \epsilon^2 \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{w_\theta(E_{0,\theta})}{E_H - E_0 e^{-2i\theta}}$$

avec

$$w_\theta(E_{0,\theta}) = \overline{v_{-\theta}(E_{0,-\theta})} v_\theta(E_{0,\theta})$$

En vue de simplifier la résolution de cette équation, nous établissons d'abord l'expression analytique de $w_\theta(E_{0,\theta})$, puis celle de l'intégrale $\int_0^{+\infty} dE_0 \frac{w_\theta(E_{0,\theta})}{E_H - E_0 e^{-2i\theta}}$.

Notons, pour commencer, que

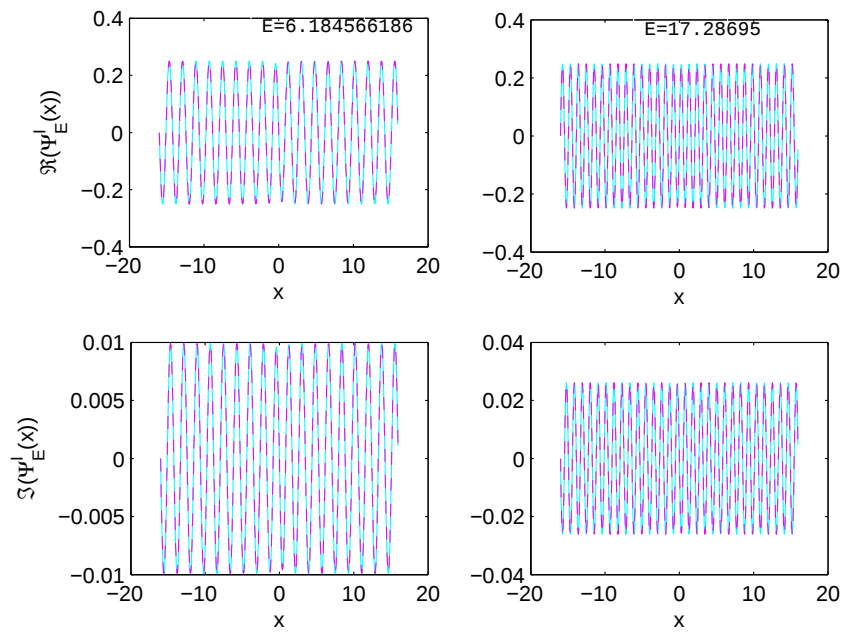


FIG. 2.8 – Même chose que pour la figure 2.5, mais avec $E_0 = 6.184566186$ u.a et $E_0 = 17.28695$ u.a

$$v_{\theta}(E_{0,\theta}) = \langle \varphi_{0,-\theta} | x e^{i\theta} | \Psi_{E_{0,\theta}}^I \rangle \quad (2.118)$$

$$= \frac{e^{i\lambda_{E_{0,\theta}}} \sqrt{2}}{12\sqrt{1+k_{0,\theta}^2}} e^{i\theta} \int_{-\infty}^{+\infty} x \operatorname{sech}(x_{\theta}) \left\{ \tanh(x_{\theta}) \cos(k_0 x) + k_{0,\theta} \sin(k_0 x) \right\} dx \quad (2.119)$$

où $\lambda_{E_{0,\theta}} = \arg(1 + ik_{0,\theta}) - k_{0,\theta} \ln(2)$. Par suite,

$$v_{-\theta}(E_{0,-\theta}) = \frac{e^{i\lambda_{E_{0,-\theta}}} \sqrt{2}}{12\sqrt{1+k_{0,-\theta}^2}} e^{-i\theta} \int_{-\infty}^{+\infty} x \operatorname{sech}(x_{\theta}^*) \left\{ \tanh(x_{\theta}^*) \cos(k_0 x) + k_{0,\theta}^* \sin(k_0 x) \right\} dx, \quad (2.120)$$

$$\overline{v_{-\theta}(E_{0,-\theta})} = \frac{e^{-i\lambda_{E_{0,\theta}}} \sqrt{2}}{12\sqrt{1+k_{0,\theta}^2}} e^{i\theta} \times \overline{\int_{-\infty}^{+\infty} x \operatorname{sech}(x_{\theta}^*) \left\{ \tanh(x_{\theta}^*) \cos(k_0 x) + k_{0,\theta}^* \sin(k_0 x) \right\} dx} \quad (2.121)$$

et

$$\overline{v_{-\theta}(E_{0,-\theta})} v_{\theta}(E_{0,\theta}) = \frac{e^{2i\theta}}{72(1+k_{0,\theta}^2)} \int_{-\infty}^{+\infty} x \operatorname{sech}(x_{\theta}) \left\{ \tanh(x_{\theta}) \cos(k_0 x) + k_{0,\theta} \sin(k_0 x) \right\} dx \times \overline{\int_{-\infty}^{+\infty} x \operatorname{sech}(x_{\theta}^*) \left\{ \tanh(x_{\theta}^*) \cos(k_0 x) + k_{0,\theta}^* \sin(k_0 x) \right\} dx} \quad (2.122)$$

Procédant de la même façon que dans le cas où $\theta = 0$ (section 2.4.2) pour calculer les deux intégrales présentes dans l'équation (2.122), nous trouvons :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} x \operatorname{sech}(x_{\theta}) \left\{ \tanh(x_{\theta}) \cos(k_0 x) + k_{0,\theta} \sin(k_0 x) \right\} dx \\ = e^{-2i\theta} \pi \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2} k_{0,\theta}\right), \end{aligned} \quad (2.123)$$

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} x \operatorname{sech}(x_{\theta}^*) \{ \tanh(x_{\theta}^*) \cos(k_0 x) + k_{0,\theta}^* \sin(k_0 x) \} dx \\
& = e^{2i\theta} \pi \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2} k_{0,\theta}^*\right), \quad (2.124)
\end{aligned}$$

et donc

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} x \operatorname{sech}(x_{\theta}^*) \{ \tanh(x_{\theta}^*) \cos(k_0 x) + k_{0,\theta}^* \sin(k_0 x) \} dx \\
& = e^{-2i\theta} \pi \operatorname{sech}\left(\frac{\pi}{2} k_{0,\theta}\right) \quad (2.125)
\end{aligned}$$

En insérant (2.123) et (2.125) dans (2.122), nous aboutissons à :

$$w_{\theta}(E_{0,\theta}) = e^{-2i\theta} \frac{\pi^2}{72(1 + k_{0,\theta}^2)} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi}{2} k_{0,\theta}\right) \quad (2.126)$$

Les figures 2.9 et 2.10 montrent les graphes de $w_{\theta}(E_{0,\theta})$ en fonction de E_0 pour $\theta = 0.15$ rd et $\theta = 10^{-10}$ rd respectivement. La figure 2.10 contient en plus la courbe de $|v(E_0)|^2$. Nous voyons que $w_{\theta}(E_{0,\theta}) \rightarrow |v(E_0)|^2$ lorsque $\theta \rightarrow 0$.

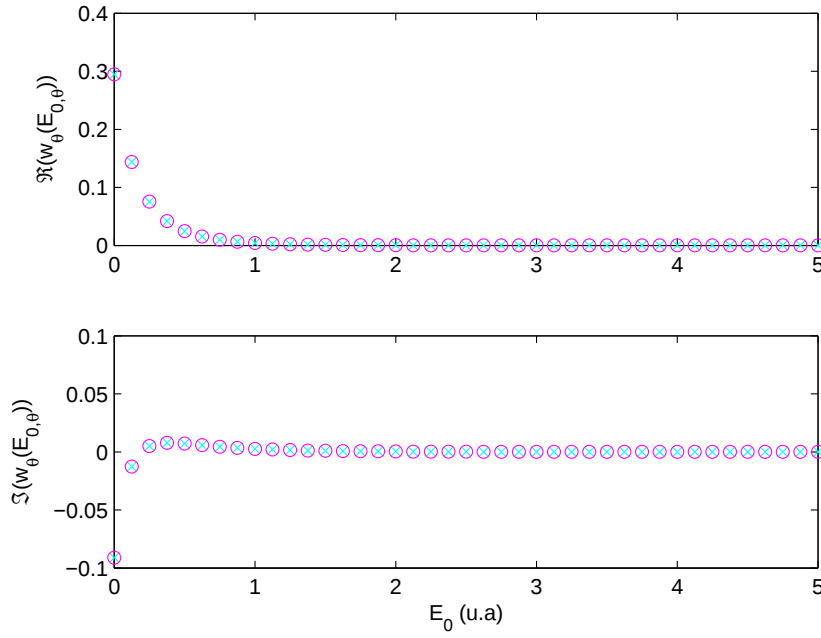


FIG. 2.9 – Parties réelle et imaginaire de la fonction $w_\theta(E_{0,\theta})$, en fonction de E_0 , pour $\theta = 0.15$ rd. En $\times$: $w_\theta(E_{0,\theta})$ est donné par l'équation (2.126). En o : $w_\theta(E_{0,\theta})$ est donné par l'équation (2.122). Cette figure montre que les deux équations sont équivalentes.

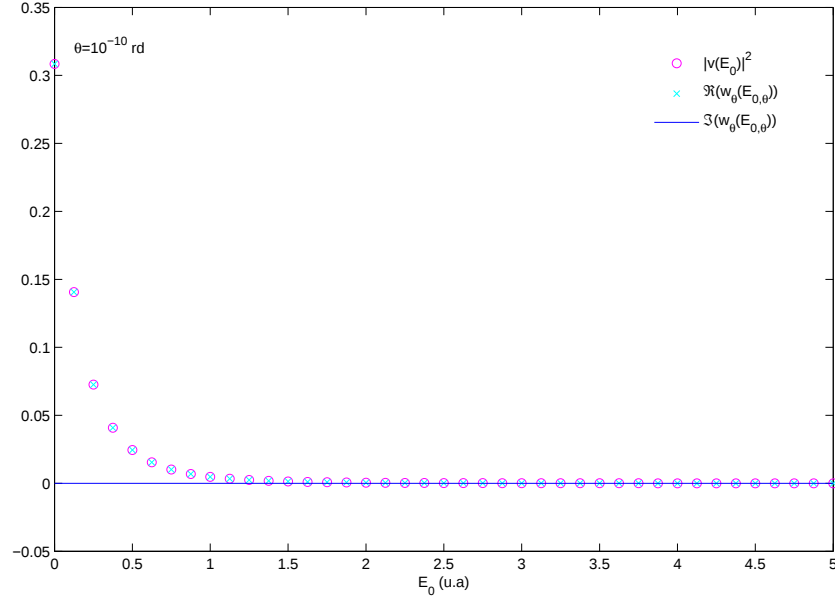


FIG. 2.10 – Graphes de $|v(E_0)|^2$ et des parties réelle et imaginaire de $w_\theta(E_{0,\theta})$, en fonction de E_0 , lorsque $\theta \rightarrow 0$. Nous avons utilisé les relations (2.111) et (2.126) pour $|v(E_0)|$ et $w_\theta(E_{0,\theta})$.

Les figures 2.11 et 2.12 contiennent les courbes de la quantité

$$I_\theta^{(n+1)} \stackrel{\text{déf}}{=} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{w_\theta(E_{0,\theta})}{(E_0 e^{-2i\theta} - \hbar\omega_0)^{n+1}}, \quad (2.127)$$

en fonction de θ , pour deux valeurs de $\hbar\omega_0$ arbitrairement choisies, et pour les premières valeurs de n . Nous avons utilisé l'expression (2.126) de $w_\theta(E_{0,\theta})$.

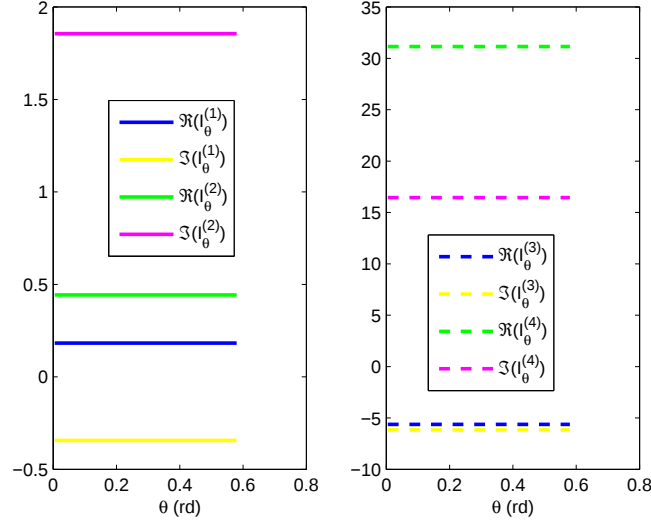


FIG. 2.11 – Parties réelle et imaginaire de $I_\theta^{(n+1)}$, en fonction de θ , pour $n=0, 1, 2, 3$ et $\hbar\omega_0 = 0.17 u.a.$ $I_\theta^{(n+1)}$ ne dépend pas de l'angle de rotation complexe.

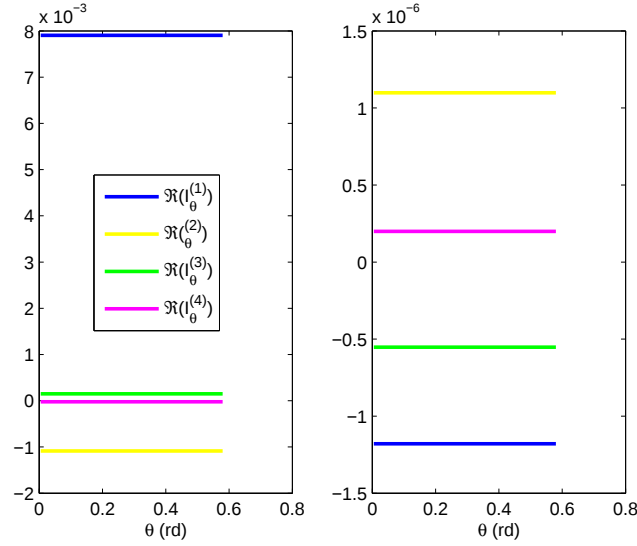


FIG. 2.12 – Parties réelles (à gauche) et imaginaires (à droite) de $I_\theta^{(n+1)}$, en fonction de θ , pour $n=0, 1, 2, 3$ et $\hbar\omega_0 = 7.57 u.a.$

Etablissons maintenant l'expression analytique de

$$F(E_H, \theta) \equiv \int_0^{+\infty} dE \frac{w_\theta(E_{0,\theta})}{E_H - E_0 e^{-2i\theta}} \quad (2.128)$$

Sachant que

$$\begin{aligned} w_\theta(E_{0,\theta}) &= \frac{\pi^2 e^{-2i\theta}}{72(1 + k_{0,\theta}^2)} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi}{2} k_{0,\theta}\right) \\ &= \frac{\pi^2 e^{-2i\theta}}{72(1 - i k_0 e^{-i\theta})(1 + i k_0 e^{-i\theta})} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi}{2} k_0 e^{-i\theta}\right), \end{aligned} \quad (2.129)$$

nous avons :

$$F(E_H, \theta) = e^{-2i\theta} \frac{\pi^2}{72} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{\operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi}{2} k_0 e^{-i\theta}\right)}{(1 - i k_0 e^{-i\theta})(1 + i k_0 e^{-i\theta})(E_H - E_0 e^{-2i\theta})} \quad (2.130)$$

En faisant le changement de variable $E_0 = \frac{1}{2} k_0^2$, nous obtenons

$$F(E_H, \theta) = e^{-2i\theta} \frac{\pi^2}{72} \int_0^{+\infty} dk_0 \frac{k_0 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi}{2} k_0 e^{-i\theta}\right)}{(1 - i k_0 e^{-i\theta})(1 + i k_0 e^{-i\theta})(E_H - \frac{1}{2} k_0^2 e^{-2i\theta})} \quad (2.131)$$

A partir de l'équation (2.131), nous aboutissons, après quelques transformations, à

$$F(E_H, \theta) = -e^{2i\theta} \frac{\pi^2}{36} \int_0^{+\infty} dk_0 \frac{k_0 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi}{2} k_0 e^{-i\theta}\right)}{(k_0 + i e^{i\theta})(k_0 - i e^{i\theta})(k_0 - \sqrt{2E_H} e^{i\theta})(k_0 + \sqrt{2E_H} e^{i\theta})}, \quad (2.132)$$

ou bien :

$$F(E_H, \theta) = -e^{2i\theta} \frac{\pi^2}{36} I(E_H, \theta) \quad (2.133)$$

avec

$$I(E_H, \theta) = \int_0^{+\infty} dk_0 \frac{k_0 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi}{2} k_0 e^{-i\theta}\right)}{(k_0 + i e^{i\theta})(k_0 - i e^{i\theta})(k_0 - \sqrt{2E_H} e^{i\theta})(k_0 + \sqrt{2E_H} e^{i\theta})} \quad (2.134)$$

Pour calculer $I(E_H, \theta)$, nous considérons l'intégrale

$$J(E_H, \theta) \equiv \int_0^{+\infty} dk_0 \frac{k_0 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi}{2} k_0 e^{-i\theta}\right)}{(k_0 + i e^{i\theta})(k_0 - i e^{i\theta})(k_0 - \sqrt{2E_H} e^{i\theta})(k_0 + \sqrt{2E_H} e^{i\theta})} \ln(k_0) \quad (2.135)$$

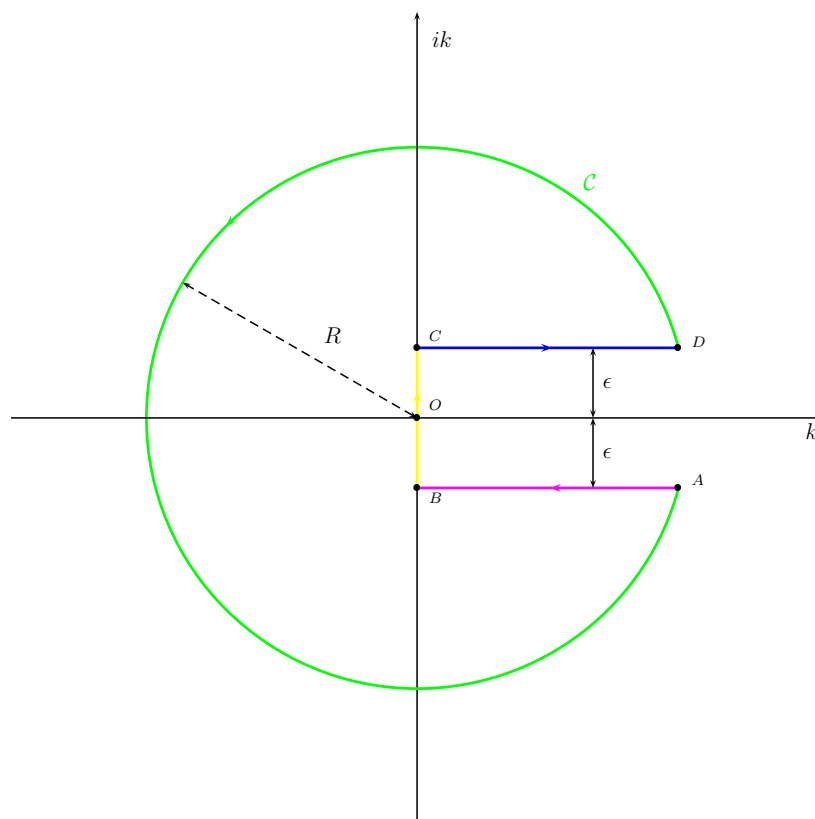


FIG. 2.13 – Contour d'intégration pour l'intégrale (2.135).

et le contour d'intégration $\Gamma \equiv ABCDC$ ci-dessous, où $R \rightarrow +\infty$ et $\epsilon \rightarrow 0^+$

Posons

$$f(z) = \frac{z \operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi}{2} z e^{-i\theta}\right)}{(z + i e^{i\theta})(z - i e^{i\theta})(z - \sqrt{2E_H} e^{i\theta})(z + \sqrt{2E_H} e^{i\theta})} \ln(z) \quad (2.136)$$

D'après le *thorème des résidus*, nous avons :

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} f(z) dz &= \lim_{R \rightarrow +\infty} \int_{CD} f(z) dz + \lim_{R \rightarrow +\infty} \int_C f(z) dz \\ &+ \lim_{R \rightarrow +\infty} \int_{AB} f(z) dz + \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{BC} f(z) dz \\ &= 2\pi i \sum_j \operatorname{Res}(f(z), z_j), \end{aligned} \quad (2.137)$$

où les z_j sont les pôles de $f(z)$ situés à l'intérieur du contour Γ .

Remarquons que :

- l'intégrale le long de C tend vers zéro lorsque $R \rightarrow +\infty$,
- l'intégrale le long de BC tend vers zéro lorsque $\epsilon \rightarrow 0^+$,
- sur le trajet CD ,

$$f(z) = f(k_0) \quad (2.138)$$

et donc

$$\lim_{R \rightarrow +\infty} \int_{CD} f(z) dz = \int_0^{+\infty} f(k_0) dk_0 = J(E_H, \theta) \quad (2.139)$$

- le long du trajet AB ,

$$z = k_0 e^{2\pi i} \quad (2.140)$$

et donc

$$f(z) = \frac{k_0 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi}{2} k_0 e^{-i\theta}\right)}{(k_0 + i e^{i\theta})(k_0 - i e^{i\theta})(k_0 - \sqrt{2E_H} e^{i\theta})(k_0 + \sqrt{2E_H} e^{i\theta})} \ln(k_0 e^{2\pi i}) \quad (2.141)$$

$$= f(k_0) + 2\pi i \frac{k_0 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi}{2} k_0 e^{-i\theta}\right)}{(k_0 + i e^{i\theta})(k_0 - i e^{i\theta})(k_0 - \sqrt{2E_H} e^{i\theta})(k_0 + \sqrt{2E_H} e^{i\theta})} \quad (2.142)$$

En conséquence,

$$\lim_{R \rightarrow +\infty} \int_{AB} f(z) dz = -J(E_H, \theta) - 2\pi i I(E_H, \theta) \quad (2.143)$$

Par suite, l'équation (2.137) devient :

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} f(z) dz &= J(E_H, \theta) + 0 - J(E_H, \theta) - 2\pi i I(E_H, \theta) + 0 \\ &= 2\pi i \sum_j \text{Res}(f(z), z_j) \end{aligned} \quad (2.144)$$

Nous en déduisons :

$$I(E_H, \theta) = - \sum_j \text{Res}(f(z), z_j) \quad (2.145)$$

Le calcul de $I(E_H, \theta)$ se réduit donc à celui des résidus de la fonction $f(z)$ en tous ses pôles. Ces pôles sont :

- $z_{E_H+} \equiv \sqrt{2E_H} e^{i\theta}$ de multiplicité 1
- $z_{E_H-} \equiv -\sqrt{2E_H} e^{i\theta}$ de multiplicité 1
- $z_{1-} \equiv -ie^{i\theta}$ de multiplicité 3
- $z_{1+} \equiv ie^{i\theta}$ de multiplicité 3
- $z_{n+} \equiv nie^{i\theta}$ de multiplicité 2, avec $n=3, 5, 7, 9, 11, 13, \dots$
- $z_{n-} \equiv -nie^{i\theta}$ de multiplicité 2, avec $n=3, 5, 7, 9, 11, 13, \dots$

Après le calcul de tous les résidus de $f(z)$ et insertion de ces derniers dans l'équation (2.145), on obtient :

$$\begin{aligned}
I(E_H, \theta) = & -\frac{e^{-2i\theta}}{2} \left[2i\theta - i\pi + 2 \ln(\sqrt{2E_H}) \right] \frac{\text{sech}^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{2E_H}\right)}{1 + 2E_H} \\
& + \frac{e^{-2i\theta}}{3\pi^2(1 + 2E_H)^3} \left[-24 + i\theta(21 + \pi^2) \right. \\
& \quad \left. - 4(12 + 15i\theta - i\pi^2\theta)E_H + 4i\theta(\pi^2 - 3)E_H^2 \right] \\
& - \frac{8e^{-2i\theta}}{\pi^2} \lim_{n_{max} \rightarrow +\infty} \sum_{\substack{n=3 \\ n \text{ impair}}}^{n_{max}} \left\{ \frac{1}{(n^2 - 1)^2(n^2 + 2E_H)^2} \left[2E_H \right. \right. \\
& \quad \left. + 2i\theta E_H + (1 - 2E_H - i\theta + 2i\theta E_H - n^2 + 3i\theta n^2)n^2 \right. \\
& \quad \left. \left. + (2E_H - n^2 + 2n^2 E_H + 3n^4) \ln(n) \right] \right\} \quad (2.146)
\end{aligned}$$

En insérant (2.146) dans (2.133), nous trouvons :

$$\begin{aligned}
F(E_H, \theta) = & \frac{\pi^2}{72} \left\{ \left[2i\theta - i\pi + 2 \ln(\sqrt{2E_H}) \right] \frac{\text{sech}^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{2E_H}\right)}{1 + 2E_H} \right. \\
& - \frac{2}{3\pi^2(1 + 2E_H)^3} \left[-24 + i\theta(21 + \pi^2) - 4(12 + 15i\theta \right. \\
& \quad \left. - i\pi^2\theta)E_H + 4i\theta(\pi^2 - 3)E_H^2 \right] \\
& + \frac{16}{\pi^2} \lim_{n_{max} \rightarrow \infty} \sum_{\substack{n=3 \\ n \text{ impair}}}^{n_{max}} \frac{1}{(n^2 - 1)^2(n^2 + 2E_H)^2} \left[2E_H + 2i\theta E_H \right. \\
& \quad \left. + (1 - 2E_H - i\theta + 2i\theta E_H - n^2 + 3i\theta n^2)n^2 \right. \\
& \quad \left. \left. + (2E_H - n^2 + 2n^2 E_H + 3n^4) \ln(n) \right] \right\} \quad (2.147)
\end{aligned}$$

Le terme général de la somme intervenant dans l'équation (2.147) tend vers zéro lorsque n tend vers $+\infty$. Cette somme peut donc être tronquée sans modifier sensiblement le résultat final, à condition de prendre une valeur de n_{max} suffisamment grande.

La figure 2.14 contient les graphes des parties réelle et imaginaire de $F(E_H, \theta)$ en fonction de θ pour quelques valeurs de E_H arbitrairement choisies.

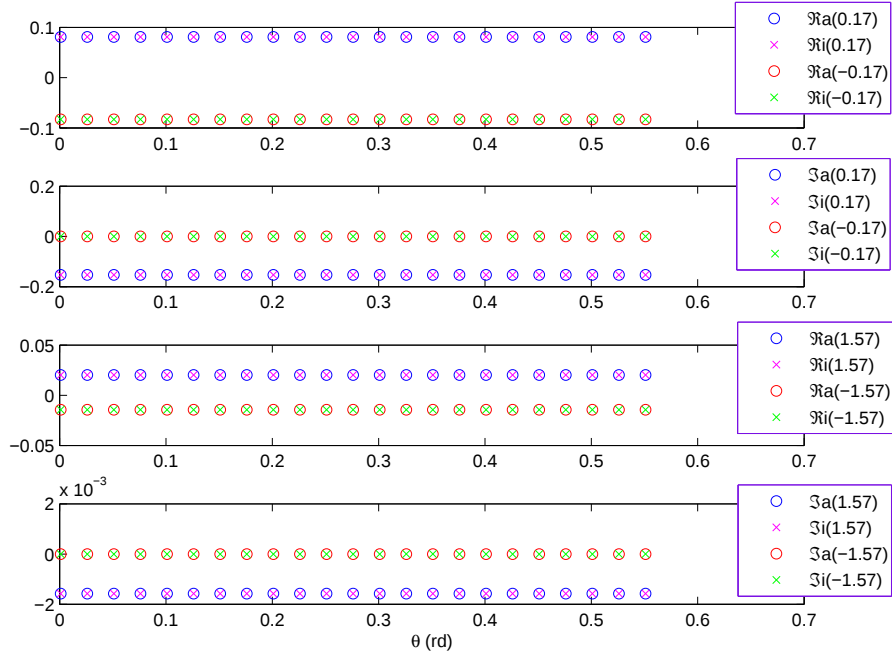


FIG. 2.14 – Parties réelle et imaginaire de $F(E_H, \theta)$, en fonction de θ , pour quelques valeurs de E_H . $\Re a$ et $\Re i$ désignent les parties réelles calculées à l'aide des formules (2.128) et (2.147) respectivement. Les parties imaginaires correspondantes sont notées $\Im a$ et $\Im i$ respectivement. Les nombres placés entre parenthèses dans la légende représentent les valeurs de E_H en unités atomiques.

On peut utiliser l'équation (2.147) pour calculer la quantité

$$P_c(E) \equiv \mathcal{P} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{|v(E_0)|^2}{E - E_0} \quad (2.148)$$

qui intervient dans la définition du coefficient de normalisation des fonctions propres du nouveau continuum (équations (2.46) et (2.47)) dans le cas réel. En effet, l'expression (2.147) permet d'écrire :

$$\begin{aligned} F(E, \theta) &\equiv \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{|v(E_0)|^2}{E - E_0 e^{-2i\theta}} \\ &= \frac{\pi^2}{72} \left\{ \left[2i\theta - i\pi + 2 \ln(\sqrt{2E}) \right] \frac{\text{sech}^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{2E}\right)}{1 + 2E} \right. \\ &\quad - \frac{2}{3\pi^2(1 + 2E)^3} \left[-24 + i\theta(21 + \pi^2) - 4(12 + 15i\theta \right. \\ &\quad \left. \left. - i\pi^2\theta)E + 4i\theta(\pi^2 - 3)E^2 \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{16}{\pi^2} \lim_{n_{max} \rightarrow \infty} \sum_{\substack{n=3 \\ n \text{ impair}}}^{n_{max}} \frac{1}{(n^2 - 1)^2(n^2 + 2E)^2} \left[2E + 2i\theta E \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (1 - 2E - i\theta + 2i\theta E - n^2 + 3i\theta n^2)n^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (2E - n^2 + 2n^2 E + 3n^4) \ln(n) \right] \right\} \quad (2.149) \end{aligned}$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned} \lim_{\theta \rightarrow 0} F(E, \theta) &= -i\pi \frac{\pi^2}{72} \frac{\text{sech}^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{2E}\right)}{1 + 2E} + \frac{\pi^2}{36} \ln(\sqrt{2E}) \frac{\text{sech}^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{2E}\right)}{1 + 2E} \\ &\quad + \frac{2}{9(1 + 2E)^2} \\ &\quad + \frac{2}{9} \lim_{n_{max} \rightarrow \infty} \sum_{\substack{n=3 \\ n \text{ impair}}}^{n_{max}} \frac{1}{(n^2 - 1)^2(n^2 + 2E)^2} \\ &\quad \left[2E + (1 - 2E - n^2)n^2 + (2E - n^2 + 2n^2 E + 3n^4) \ln(n) \right] \quad (2.150) \end{aligned}$$

ou bien

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} F(E, \theta) = -i\pi |v(E)|^2 + h(E) \quad (2.151)$$

avec

$$\begin{aligned} h(E) &= \frac{\pi^2}{36} \ln(\sqrt{2E}) \frac{\operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{2E}\right)}{1+2E} \\ &+ \frac{2}{9(1+2E)^2} \\ &+ \frac{2}{9} \lim_{n_{max} \rightarrow \infty} \sum_{\substack{n=3 \\ n \text{ impair}}}^{n_{max}} \\ &\frac{\left[2E + (1-2E-n^2)n^2 + (2E-n^2+2n^2E+3n^4) \ln(n)\right]}{(n^2-1)^2(n^2+2E)^2} \end{aligned} \quad (2.152)$$

On montre (tableaux 2.2 et 2.3) que la fonction $h(E)$ n'est rien d'autre que $-\mathcal{P} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{|v(E_0)|^2}{E-E_0}$. D'où :

$$\begin{aligned} \lim_{\theta \rightarrow 0} [-F(E, \theta)] &\equiv \lim_{\theta \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{w_\theta(E_0, \theta)}{E_0 e^{-2i\theta} - E} \\ &= i\pi |v(E)|^2 + \mathcal{P} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{|v(E_0)|^2}{E-E_0}, \end{aligned} \quad (2.153)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{|v(E_0)|^2}{E-E_0} &= -\frac{\pi^2}{36} \ln(\sqrt{2E}) \frac{\operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{2E}\right)}{1+2E} \\ &- \frac{2}{9(1+2E)^2} \\ &- \frac{2}{9} \lim_{n_{max} \rightarrow \infty} \sum_{\substack{n=3 \\ n \text{ impair}}}^{n_{max}} \\ &\frac{\left[2E + (1-2E-n^2)n^2 + (2E-n^2+2n^2E+3n^4) \ln(n)\right]}{(n^2-1)^2(n^2+2E)^2} \end{aligned} \quad (2.154)$$

E	$P_{C, an}(E)$	$P_{C, num}(E)$
0.0100000	0.276751067978	0.276751067981
0.0200000	0.169300231658	0.169300231661
0.0300000	0.106880147058	0.106880147060
0.0400000	0.064084916093	0.064084916094
0.0500000	0.032549068847	0.032549068849
0.0600000	0.008369550112	0.008369550114
0.0700000	-0.010627077715	-0.010627077716
0.0800000	-0.025789610492	-0.025789610492
0.0900000	-0.038018425133	-0.038018425133
0.1000000	-0.047946701706	-0.047946701706
0.1100000	-0.056037324557	-0.056037324556
0.1200000	-0.062638915336	-0.062638915333
0.1300000	-0.068020269864	-0.068020269861
0.1400000	-0.072392579484	-0.072392579486
0.1500000	-0.075924352113	-0.075924352115
0.1600000	-0.078751767542	-0.078751767543
0.1700000	-0.080986066373	-0.080986066374
0.1800000	-0.082718948048	-0.082718948048
0.1900000	-0.084026594955	-0.084026594954
0.2000000	-0.084972725229	-0.084972725230
0.2100000	-0.085610944193	-0.085610944193
0.2200000	-0.085986579882	-0.085986579881
0.2300000	-0.086138132838	-0.086138132836
0.2400000	-0.086098433200	-0.086098433198
0.2500000	-0.085895572836	-0.085895572832
0.2600000	-0.085553662494	-0.085553662489
0.2700000	-0.085093451469	-0.085093451473
0.2800000	-0.084532838208	-0.084532838211
0.2900000	-0.083887293524	-0.083887293526
0.3000000	-0.083170213494	-0.083170213496
0.3100000	-0.082393215110	-0.082393215112
0.3200000	-0.081566385167	-0.081566385168
0.3300000	-0.080698490675	-0.080698490679
0.3400000	-0.079797157473	-0.079797157474
0.3500000	-0.078869022332	-0.078869022334
0.3600000	-0.077919863023	-0.077919863023
0.3700000	-0.076954709783	-0.076954709785
0.3800000	-0.075977941208	-0.075977941208
0.3900000	-0.074993366891	-0.074993366892
0.4000000	-0.074004298892	-0.074004298895
0.4100000	-0.073013613637	-0.073013613640
0.4200000	-0.072023805669	-0.072023805669
0.4300000	-0.071037034409	-0.071037034412
0.4400000	-0.070055164956	-0.070055164956
0.4500000	-0.069079803655	-0.069079803657

TAB. 2.2 – Colonne de gauche : Energie E . Colonne du milieu : $\mathcal{P} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{|v(E_0)|^2}{E-E_0}$ calculée analytiquement à l'aide de l'équation (2.154). Colonne de droite $\mathcal{P} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{|v(E_0)|^2}{E-E_0}$ calculée numériquement. Nous voyons que les deux méthodes mènent au même résultat.

Notons que pour calculer numériquement $\mathcal{P} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{|v(E_0)|^2}{E-E_0}$, nous avons utilisé la relation[Guerin]

$$\mathcal{P} \int_0^{+\infty} dx \frac{f(x)}{x-a} = \int_0^{2a} dx g(x) + \int_{2a}^{+\infty} dx \frac{f(x)}{x-a} \quad (2.155)$$

avec

$$g(x) = \begin{cases} \frac{f(x)-f(a)}{x-a} & \text{si } x \neq a \\ f'(a) & \text{si } x = a. \end{cases} \quad (2.156)$$

La figure (2.15) montre l'allure du carré du module du coefficient de normalisation $A(E)$ (équation (2.47)) apparaissant dans la définition des fonctions propres du nouveau continuum (équations (2.42) et (2.44)). Nous avons utilisé la formule (2.154) pour $\mathcal{P} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{|v(E_0)|^2}{E-E_0}$. Cette figure montre que, après couplage, le niveau discret $|\varphi_0\rangle$ est dissous dans le continuum sur un intervalle de largeur fini. En d'autres termes, seuls les niveaux du nouveau continuum situés dans cet intervalle autour de $\hbar\omega_0$ conservent dans leur fonction le souvenir du niveau $|\varphi_0\rangle$.

E	$P_{C, an}(E)$	$P_{C, num}(E)$
1.0000000	-0.033774231897	-0.033774231897
1.2500000	-0.026274171943	-0.026274171944
1.5000000	-0.021257655562	-0.021257655562
1.7500000	-0.017739950645	-0.017739950645
2.0000000	-0.015169853167	-0.015169853167
2.2500000	-0.013225786434	-0.013225786434
2.5000000	-0.011711736866	-0.011711736866
2.7500000	-0.010503262050	-0.010503262050
3.0000000	-0.009518423148	-0.009518423148
3.2500000	-0.008701495856	-0.008701495856
3.5000000	-0.008013485341	-0.008013485341
3.7500000	-0.007426404708	-0.007426404708
4.0000000	-0.006919711325	-0.006919711325
4.2500000	-0.006478021994	-0.006478021994
4.5000000	-0.006089609201	-0.006089609201
4.7500000	-0.005745387733	-0.005745387733
5.0000000	-0.005438216908	-0.005438216908
5.2500000	-0.005162410648	-0.005162410648
5.5000000	-0.004913387283	-0.004913387283
5.7500000	-0.004687415132	-0.004687415132
6.0000000	-0.004481424853	-0.004481424853
6.2500000	-0.004292869148	-0.004292869148
6.5000000	-0.004119616506	-0.004119616506
6.7500000	-0.003959869797	-0.003959869797
7.0000000	-0.003812103214	-0.003812103214
7.2500000	-0.003675012928	-0.003675012928
7.5000000	-0.003547478127	-0.003547478127
7.7500000	-0.003428529960	-0.003428529960
8.0000000	-0.003317326608	-0.003317326608
8.2500000	-0.003213133090	-0.003213133090
8.5000000	-0.003115304815	-0.003115304815
8.7500000	-0.003023274075	-0.003023274075
9.0000000	-0.002936538895	-0.002936538895
9.2500000	-0.002854653770	-0.002854653770
9.5000000	-0.002777221927	-0.002777221927
9.7500000	-0.002703888823	-0.002703888823
10.0000000	-0.002634336665	-0.002634336665

TAB. 2.3 – Colonne de gauche : Energie E . Colonne du milieu : $\mathcal{P} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{|v(E_0)|^2}{E-E_0}$ calculée analytiquement à l'aide de l'équation (2.154). Colonne de droite $\mathcal{P} \int_0^{+\infty} dE_0 \frac{|v(E_0)|^2}{E-E_0}$ calculée numériquement.

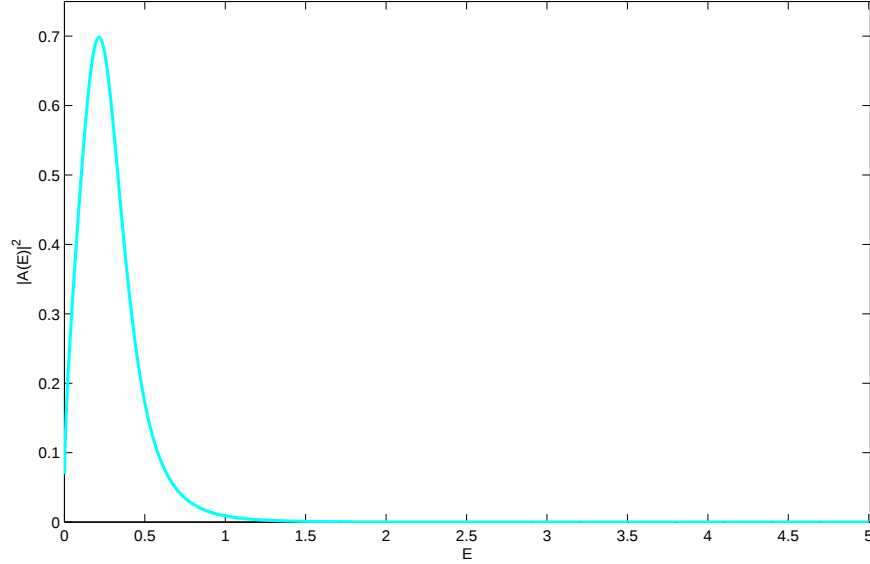


FIG. 2.15 – Graphe de $|A(E)|^2$ en fonction de E lorsque le paramètre de couplage $\varepsilon = 1.7$ et $\hbar\omega_0 = 0.17$ u.a.

Energies complexes de résonance

En insérant (2.147) dans (2.27), nous obtenons une équation en E_H , facile à résoudre, dont les solutions correspondent aux énergies de résonance. Le tableau 2.4 contient quelques énergies complexes de résonance trouvées en résolvant cette équation. Ces énergies peuvent être reproduites numériquement en diagonalisant le hamiltonien total tourné H_θ . La figure 2.16 montre une partie du spectre du hamiltonien total tourné H_θ lorsque $\varepsilon = 0.25405628$ et $\hbar\omega_0 = 0.143971816257$ u.a (ligne 3 du tableau 2.4). Cette figure exhibe une résonance dont l'énergie est proche de celle trouvée en résolvant l'équation (2.27).

ε	$\hbar\omega_0$ (u.a)	$\Re(E_r)$ (u.a)	$\Im(E_r)$ (u.a)
0.14774580951871	0.14821776213234	0.14995312744136	-0.00374960938721
0.20819663645509	0.14620858285886	0.14981253905924	-0.00749687539060
0.25405628002614	0.14397181625702	0.14957832271683	-0.01123945609091
0.29226471621419	0.14150693810477	0.14925062479170	-0.01497501249702
0.32551751854658	0.13881354893896	0.14882965008440	-0.01870121000778
0.35520020552458	0.13589137744582	0.14831566169041	-0.02241571987104
0.38213726627593	0.13274028422371	0.14770898083574	-0.02611622063904
0.40686656863316	0.12936026596222	0.14700998667619	-0.02980039961926
0.42976198403712	0.12575146008498	0.14621911606034	-0.03346595431976
0.45109576300130	0.12191414990754	0.14533686325660	-0.03711059388818
0.47107332812839	0.11784877036562	0.14436377964424	-0.04073204054342
0.48985407567725	0.11355591437325	0.14330047336884	-0.04432803099920
0.50756450528016	0.10903633987460	0.14214760896222	-0.04789631787855
0.52430687692046	0.10429097765744	0.14090590692711	-0.05143467111832
0.54016512742336	0.09932094000105	0.13957614328685	-0.05494087936291
0.55520903729809	0.09412753023541	0.13815914910043	-0.05841275134630
0.56949724112005	0.08871225329280	0.13665580994311	-0.06184811726151
0.58307945053794	0.08307682733738	0.13506706535290	-0.06524483011668
0.59599812727363	0.07722319656151	0.13339390824348	-0.06860076707684
0.60828976321593	0.07115354524137	0.13163738428356	-0.07191383079063
0.61998587423572	0.06487031314661	0.12979859124344	-0.07518195070107
0.63111378172193	0.05837621240065	0.12787867830893	-0.07840308433960
0.64169723422637	0.05167424588865	0.12587884536310	-0.08157521860255
0.65175690697513	0.04476772730930	0.12380034223645	-0.08469637100926
0.66131080690638	0.03766030296366	0.12164446792578	-0.08776459094107
0.67037460380193	0.03035597536927	0.11941256978236	-0.09077796086041
0.67896190301902	0.02285912877982	0.11710604266987	-0.09373459750915
0.68708447166700	0.01517455667955	0.11472632809267	-0.09663265308565
0.69475242738974	0.00730749130640	0.11227491329492	-0.09947031639950

TAB. 2.4 – Energies complexes de résonance.

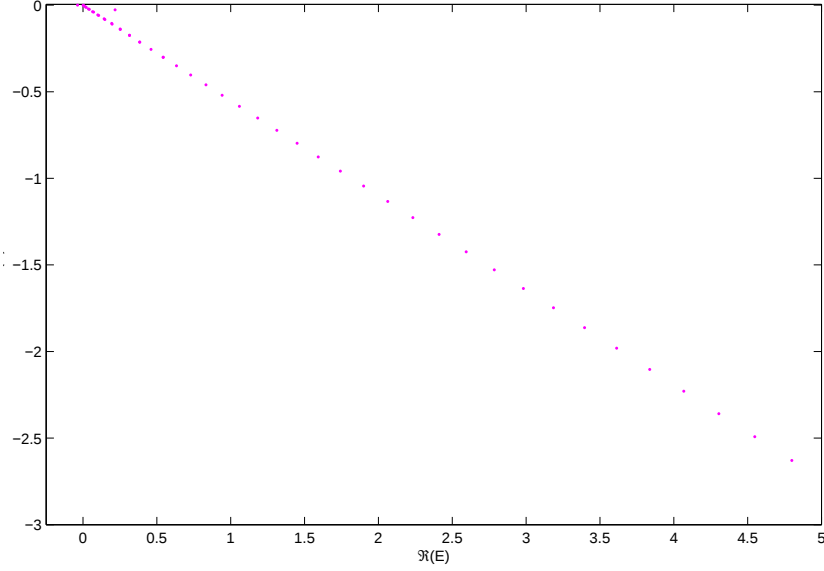


FIG. 2.16 – Spectre de H_θ pour $\theta = 0.25 \text{ rad}$, $\varepsilon = 0.25405628$ et $\hbar\omega_0 = 0.143971816257 \text{ u.a.}$

Les états induits par laser

Pour déterminer les positions des résonances correspondant aux états induits par laser, nous résolvons l'équation (2.27) dans le cas particulier où $\theta = 0$ et $E_H \in \mathbb{R}^-$. Nous prenons $\omega = 0.55 \text{ u.a}$ et donc $\omega_0 = 0.05 \text{ u.a}$. Nous présentons les résultats trouvés, pour quelques valeurs du paramètre de couplage ε , dans le tableau 2.5. Nous comparons ces résultats avec ceux obtenus en résolvant l'ESDT

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \text{sech}^2(x) - \varepsilon x \cos(\omega t) \right] \Psi(x, t) = E \Psi(x, t) \quad (2.157)$$

à l'aide de la méthode de Floquet. Nous constatons que les deux méthodes conduisent à des résultats légèrement proches. La différence vient du fait que l'on ne tient pas compte du couplage continuum-continuum dans le modèle de Friedrichs-Fano.

ε	$\Re(E)_{ff}$ (u.a)	$\Re(E)$ (u.a)	$\Im(E)$ (u.a)
1.37	-0.61347	-0.6163129	-0.008215
1.45	-0.62158	-0.6274130	-0.006157
1.54	-0.62942	-0.6300159	-0.004974
1.57	-0.63350	-0.633991	-0.0031620

TAB. 2.5 – Colonne de gauche : Valeurs du paramètre de couplage. Deuxième et troisième colonnes : positions des résonances calculées à l’aide du modèle de Friedrichs-Fano et de la méthode de Floquet respectivement. Colonne de droite : parties imaginaires des énergies de résonance trouvées avec la méthode de Floquet.

Chapitre 3

Ionisation simple de l'atome d'hélium à trois photons

3.1 Introduction

Dans un article récent[[Brou04](#)], Brouri et Urbain considèrent l'ionisation double séquentielle de l'ion He^- par impact photonique. Dans l'expérience qu'ils ont réalisée à l'UCL, ils ont montré que par absorption d'un photon, l'ion He^- effectue une transition de son état fondamental vers une série de résonances ($1s3s4s^4S^e$, $1s3p^2^4P^e$, $1s3p4p^4P^e$) à partir desquelles l'ion peut se relaxer vers les états $1s2s^3S$ et $1s2p^3P$ de l'hélium. Ceci permet d'étudier en détail l'ionisation simple multiphotonique de l'atome d'hélium à partir d'états excités. Ils ont entre autres étudié les transitions multiphotoniques à partir de l'état initial $1s2s^3S$ ou $1s2p^3P$ résultant du photodétachement de l'ion He^- . Ils se sont particulièrement intéressés au déplacement Stark de certaines de ces transitions. En prenant pour état initial $1s2s^3S$, ils ont observé que les transitions (multiphotoniques) $1s2s^3S \rightarrow 1sns^3S$ et $1s2s^3S \rightarrow 1snd^3D$ se déplacent dans le même sens, vers les grandes valeurs de l'énergie des photons. Par contre, les transitions $1s2p^3P \rightarrow 1snp^3P^e$ et $1s2p^3P \rightarrow 1snf^3F^e$ se déplacent en sens contraires, l'une vers les grandes énergies et l'autre vers les petites énergies des photons.

Dans le présent chapitre, nous faisons la même étude que Brouri et Urbain, mais théoriquement (numériquement). Notre objectif est de tenter de reproduire les résultats expérimentaux, puis de trouver une explication au déplacement en sens contraires des transitions par-

tant de l'état initial $1s2p^3P$. Nous résolvons l'équation de Schrödinger dépendante du temps par la méthode de Floquet, introduite dans le premier chapitre. En vue de réduire le temps de calcul, nous faisons appel à l'algorithme de Lanczos[Jenn92] pour diagonaliser la matrice de Floquet. Notons que dans la base atomique, nous avons besoin des valeurs propres du hamiltonien de l'atome d'hélium non perturbé pour construire le hamiltonien de Floquet. Nous procédons comme Lagmago[Lag99] pour résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps. La partie radiale de la solution est développée sur une base de fonctions sturmiennes appropriées, et sa partie angulaire sur les harmoniques dipolaires.

3.2 Brève description de l'expérience.

L'expérience dont nous voulons reproduire certains résultats numériquement, et dont une description détaillée peut être trouvée dans [Brou04], était destinée à l'étude de l'ionisation double séquentielle de l'ion He^+ à deux photons. En marge de cette étude, cette expérience a permis de mettre en évidence la possibilité d'avoir un processus d'ionisation double de He^+ à trois photons, processus séquentiel dans lequel il y a photodétachement de l'ion suivi de l'ionisation simple à deux photons de l'atome neutre obtenu, $He(1s2s^3S)$ ou $He(1s2p^3P)$ (figure 3.1). C'est justement ce processus qui nous intéresse. Nous tenons le photodétachement de l'ion He^+ pour acquis, et nous étudions l'ionisation simple à trois photons de $He(1s2s^3S)$ et $He(1s2p^3P)$.

3.3 Résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

Dans cette section, nous considérons l'atome d'hélium en l'absence d'un champ électromagnétique. Pour déterminer les énergies et les fonctions propres associées à ce système, on procède, très souvent, par la résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps sur une base finie de fonctions de carré sommable. On distingue deux types de base : les bases explicitement corrélées (EC) dans lesquelles la distance inter-électronique r_{12} est utilisée explicitement comme variable spatiale, et les bases de type interaction de configuration (IC) pour les-

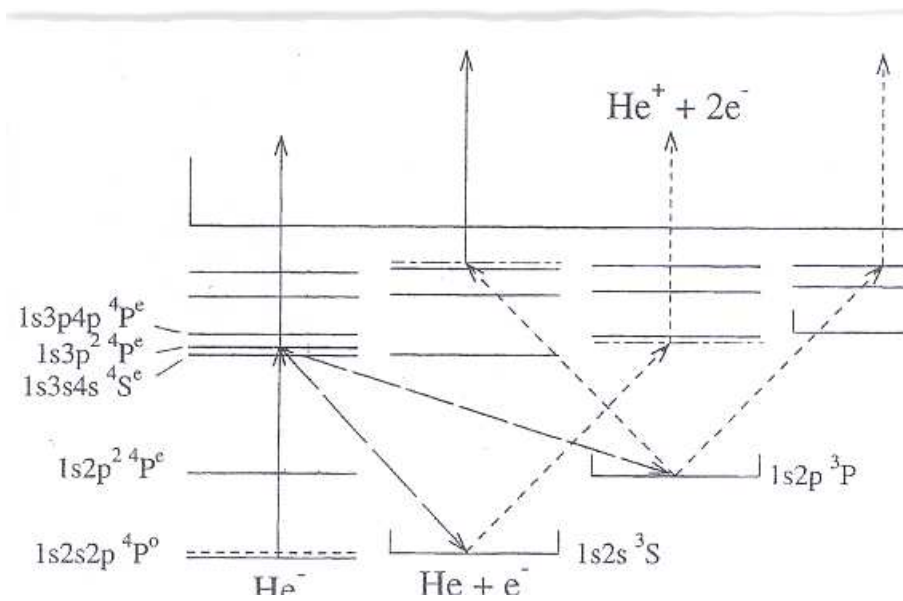


FIG. 3.1 – Représentation schématique des niveaux d'énergies pour l'ionisation simple et double de l'ion He^- à plusieurs photons. Les flèches continues représentent le processus direct, les flèches en traits courts l'ionisation séquentielle, et les flèches en traits longs le détachement spontané. Cette figure a été tirée de [Brou04].

quelles les fonctions de base sont des combinaisons linéaires symétriques ou antisymétriques des fonctions monoélectroniques. La technique que nous utilisons ici est une méthode spectrale de type IC dans laquelle la partie radiale de la fonction d'onde est décrite par des fonctions sturmiennes et la partie angulaire par les harmoniques dipolaires qui couplent les moments cinétiques individuels λ et l des deux électrons pour un moment angulaire total L donné.

Contrairement aux méthodes EC, les techniques IC peuvent facilement être appliquées aux systèmes plus complexes à plus de deux électrons. De plus, les éléments de matrice sont assez simples à évaluer. La méthode IC est fondée sur le développement en multipôles de l'interaction électron-électron :

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{q=0}^{\infty} \sum_{p=-q}^q \frac{4\pi}{2q+1} \frac{r_{<}^q}{r_{>}^{q+1}} Y_{q,p}^*(\hat{r}_1) Y_{q,p}(\hat{r}_2), \quad (3.1)$$

où $r_{<} = \min(r_1, r_2)$, $r_{>} = \max(r_1, r_2)$ et $Y_{q,p}(\hat{r})$ est une harmonique sphérique. La principale différence entre les différentes méthodes IC réside dans le choix des fonctions de base à utiliser dans les calculs.

3.3.1 Fonction d'onde du système

Le problème consiste à résoudre l'équation de Schrödinger d'un système constitué d'un noyau de masse M contenant deux protons et de deux électrons de masse m . Chaque électron est repéré par rapport au noyau par un vecteur $\vec{r}_i \equiv (r_i, \theta_i, \phi_i)$, $i = 1, 2$, et $r_{12} \equiv |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ est la distance inter-électronique. Nous avons montré, dans le chapitre I, que le hamiltonien d'un tel système peut être écrit comme suit (dans le système d'unités atomiques et dans l'approximation du noyau de masse infinie) :

$$H = H_0 + U, \quad (3.2)$$

avec

$$H_0 = \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} \quad (3.3)$$

et

$$U = \frac{1}{r_{12}}. \quad (3.4)$$

La fonction d'onde spatiale du système vérifie l'équation

$$(H_0 + U) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (3.5)$$

Cette équation reste inchangée lorsqu'on permute les coordonnées des deux électrons. Par conséquent, les fonctions $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ et $\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = P_{12} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ vérifient la même équation de Schrödinger. P_{12} désigne l'opérateur de permutation des coordonnées spatiales des deux électrons. Nous avons nécessairement

$$\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \pm \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (3.6)$$

Les fonctions d'onde spatiales ont donc une symétrie bien définie. Elles sont soit symétriques, soit antisymétriques. Celles qui sont symétriques décrivent les états “*para*” de l'hélium. Elles sont telles que

$$\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = + \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (3.7)$$

Les autres, antisymétriques, décrivent les états “*ortho*” de l'hélium et vérifient la relation

$$\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = - \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (3.8)$$

Le hamiltonien (3.3) étant indépendant du spin des électrons, toute fonction d'onde du système atomique considéré $\Psi(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$ peut s'écrire comme un produit de la fonction d'onde spatiale $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ et de la fonction d'onde de spin $\chi(1, 2)$ des deux électrons :

$$\Psi(\vec{q}_1, \vec{q}_2) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(1, 2), \quad (3.9)$$

où $\vec{q}_1$ et $\vec{q}_2$ sont les coordonnées d'espace-spin associées aux deux électrons. En ce qui concerne la partie de spin, les états possibles sont :

- le singulet antisymétrique $|0\ 0\rangle$ correspondant à un spin total $S = 0$ et sa projection $M_S = 0$ sur l'axe de quantification z ,
- le triplet symétrique correspondant à un spin $S = 1$ et aux trois valeurs des projections sur l'axe de quantification : $M_S = 1, 0, -1$.

Compte tenu du principe d'exclusion de Pauli, la fonction d'onde totale $\Psi(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$ doit être antisymétrique. En d'autres termes, si la fonction spatiale est symétrique (respectivement antisymétrique), alors il faut lui associer une fonction de spin antisymétrique (respectivement symétrique) pour obtenir un état physique antisymétrique conformément au principe

de Pauli. Il y a donc quatre combinaisons possibles. La fonction d'onde spatiale “para” sera associée à l'état de spin singulet, et la fonction spatiale “ortho” à l'un des trois états triplet de spin.

3.3.2 Développement de la partie spatiale de la fonction d'onde sur la base des fonctions sturmiennes.

Les fonctions d'onde de spin étant bien connues, seule la partie spatiale de la fonction d'onde doit être déterminée pour la description complète de l'atome d'hélium. Nous écrivons les fonctions d'onde spatiale sous la forme

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{L,M} \sum_{\lambda,l} \sum_s \sum_{\nu,n} \alpha_{\nu n}^{\lambda l} \psi_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda l L M} \mathcal{A} F_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda l L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (3.10)$$

avec

$$F_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda l L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{S_{\nu, \lambda}^{\kappa_s}(r_1)}{r_1} \Lambda_{\lambda l}^{L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{S_{n, l}^{k_s}(r_2)}{r_2}, \quad \mathcal{A} \equiv \frac{1 + \varepsilon P}{\sqrt{2}}. \quad (3.11)$$

Les lettres grecques κ , ν , λ et μ représentent respectivement le paramètre non linéaire, les nombres quantiques radial, orbital et magnétiques associés à l'électron 1, tandis que les lettres latines k , n , l , et m sont les mêmes paramètres pour l'électron 2. ε est le paramètre de symétrie. Il vaut +1 pour les états singulets et -1 pour les états triplets. L'opérateur P échange les paramètres κ et k , ν et n , λ et l simultanément pour tenir compte de l'indiscernabilité des deux électrons. Son action sur $F_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda l L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ est identique à celle de l'opérateur de permutation P_{12} . La quantité $\alpha_{\nu n}^{\lambda l}$ définie par

$$\alpha_{\nu n}^{\lambda l} = 1 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} - 1 \right) \delta_{\lambda, l} \delta_{\nu, n} \quad (3.12)$$

contrôle les éventuelles redondances qui pourraient survenir dans la base à cause de l'échange. La partie radiale des fonctions de base est décrite sur un produit de deux fonctions sturmiennes coulombiennes $S_{\nu, \lambda}^{\kappa_s}(r_1)$, que nous avons introduites dans le chapitre I, avec $\nu \geq \lambda + 1$.

La partie angulaire est décrite par les harmoniques bipolaires définies par

$$\Lambda_{\lambda l}^{LM}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\mu, m} (-1)^{\lambda-l+M} \sqrt{2L+1} \begin{pmatrix} \lambda & l & L \\ \mu & m & -M \end{pmatrix} Y_{\lambda, \mu}(\hat{r}_1) Y_{l, m}(\hat{r}_2), \quad (3.13)$$

où les fonctions $Y_{\lambda, \mu}(\hat{r})$ désignent les harmoniques sphériques et $\hat{r} \equiv (\theta, \phi)$ les coordonnées angulaires des électrons. Les harmoniques dipolaires satisfont la relation d'orthonormalisation

$$\int d\hat{r}_1 \int d\hat{r}_2 \Lambda_{\lambda' l'}^{L' M'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Lambda_{\lambda l}^{LM}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \delta_{\lambda', \lambda} \delta_{l', l} \delta_{L', L} \delta_{M', M}. \quad (3.14)$$

La fonction d'onde (3.10) possède une parité bien définie dans la mesure où elle est fonction propre de l'opérateur parité Π . D'autre part, nous savons que sous l'action de l'opérateur Π , les coordonnées spatiales (r, θ, ϕ) deviennent $(r, \pi - \theta, \pi + \phi)$. Compte tenu de la définition des harmoniques sphériques, nous avons :

$$\Pi Y_{l, m}(\theta, \phi) = Y_{l, m}(\pi - \theta, \pi + \phi) = (-1)^l Y_{l, m}(\theta, \phi). \quad (3.15)$$

$Y_{l, m}(\theta, \phi)$ a donc $(-1)^l$ pour parité. Par suite, les harmoniques bipolaires $\Lambda_{\lambda l}^{LM}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ont $(-1)^{\lambda+l}$ comme parité. Il s'ensuit que chaque couple de moment angulaire apparaissant dans le développement (3.10) doit vérifier la relation

$$(-1)^{\lambda+l} = (-1)^L \quad (3.16)$$

pour que la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ait une parité bien définie pour un moment angulaire total L et sa projection M . Notons que les valeurs prises par le moment angulaire total L sont telles que $L_{min} \leq L \leq L_{max}$ avec $L_{min} \geq 0$. La projection M de L est telle que $|M| \leq L$. Dans la suite, nous considérons l'interaction de l'atome avec un champ électrique polarisé linéairement. Dans ce cas, si l'état initial de l'atome est un état S , nous pouvons poser $M = 0$ dans tous nos calculs.

Pour chaque valeur de L , plusieurs couples de moments angulaires des électrons peuvent être sélectionnés (λ, l) , avec $0 \leq \lambda \leq \lambda_{>}$ et $0 \leq l \leq l_{>}$. Chaque couple (λ, l) doit satisfaire la condition (3.16). Pour chaque couple (λ, l) , on peut utiliser plusieurs ensembles de fonctions

sturmiennes, chacune d'elles étant associées à un couple de paramètres non linéaires (κ_s, k_s) , $s = 1, 2, \dots, N_s$. Plus précisément, à chacune des N_s valeurs de s est associé un ensemble de fonctions sturmiennes $S_{\nu, \lambda}^{\kappa_s}$ et $S_{n, l}^{k_s}$ avec $\nu = \lambda + \nu_<, \lambda + \nu_< + 1, \dots, \lambda + \nu_>$ et $n = l + n_<, l + n_< + 1, \dots, l + n_>$.

3.3.3 Formulation matricielle de l'équation de Schrödinger.

En multipliant à gauche l'équation (3.5) par $\mathcal{A}' F_{\kappa'_s k'_s \nu' n'}^{\lambda' l' L' M'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, on obtient, après intégration dans tout l'espace, l'équation matricielle

$$\sum_{L, M} \sum_{\lambda, l} \sum_s \sum_{\nu, n} \alpha_{\nu n}^{\lambda l} \psi_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda l L M} \left(H_{0 \kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M'} + U_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M'} - E S_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M'} \right) = 0, \quad (3.17)$$

où les intégrales

$$S_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M'} = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \mathcal{A}' F_{\kappa'_s k'_s \nu' n'}^{\lambda' l' L' M'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)^* \mathcal{A} F_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda l L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (3.18)$$

$$H_{0 \kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M'} = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \mathcal{A}' F_{\kappa'_s k'_s \nu' n'}^{\lambda' l' L' M'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)^* H_0 \mathcal{A} F_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda l L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (3.19)$$

et

$$U_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M'} = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \mathcal{A}' F_{\kappa'_s k'_s \nu' n'}^{\lambda' l' L' M'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)^* \frac{1}{r_{12}} \mathcal{A} F_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda l L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (3.20)$$

représentent respectivement les éléments de la matrice de recouvrement S , de la matrice du hamiltonien du modèle indépendant H_0 et de la matrice associée à l'interaction coulombienne entre les deux électrons U . Ainsi donc, résoudre l'équation de Schrödinger sur la base de fonctions sturmiennes est équivalent à résoudre le problème aux valeurs propres généralisées

$$\mathbf{H}\Psi = E\mathbf{S}\Psi, \quad \mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{U}, \quad (3.21)$$

où Ψ est un vecteur dont les composantes sont les coefficients de la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ sur la base. La matrice S est réelle, symétrique et définie positive. Celle de H est aussi réelle et symétrique lorsque les paramètres non linéaires sont réels et complexe symétrique lorsque ces paramètres sont complexes. Le détail sur l'évaluation des éléments de matrice (3.18), (3.19) et (3.20) peut être trouvé dans [Lag99]. Notons que prendre les paramètres non linéaires complexes est équivalent à faire une dilatation complexe du hamiltonien H . Signalons aussi que pour une valeur du moment angulaire total L , la matrice du hamiltonien H est pleine à cause du terme d'interaction $\frac{1}{r_{12}}$ qui couple les différents moments angulaires des électrons individuels. Par contre, la matrice de recouvrement S a une structure bloc-diagonale, chaque bloc étant associé à un couple de moment angulaire (λ, l) . Chaque bloc peut contenir un ou plusieurs sous-blocs. Un sous-bloc correspond à un ensemble de paramètres non linéaires donné.

3.3.4 Résolution numérique de l'équation de Schrödinger.

L'utilisation de plusieurs ensembles de paramètres non linéaires rend la base numériquement surcomplète en ce sens que la matrice de recouvrement, qui est en principe définie positive, ne l'est plus et possède des valeurs propres proches de 0. La raison est que les ordinateurs représentent les nombres avec une précision finie. Cette situation entraîne des problèmes numériques dans la mesure où l'on est obligé d'inverser la matrice de recouvrement pour résoudre l'équation de Schrödinger. Nous avons adopté la même technique que Lagmago [Lag99] pour contourner ce problème. Cette technique peut se résumer en deux étapes :

1. Définition d'un paramètre de coupure ε_c de l'ordre de 10^{-12} . Toutes les valeurs propres de la matrice de recouvrement inférieures à ε_c sont éliminées.
2. Redéfinition du problème aux valeurs propres avec la nouvelle matrice de H .

Supposons, pour plus de détails, que n soit la taille des matrices H et S de départ, et désignons par T la matrice orthogonale qui diagonalise la matrice de recouvrement S . Alors, nous avons :

$$\mathbf{T}^t \mathbf{S} \mathbf{T} = \mathbf{s}, \quad (3.22)$$

$\mathbf{s}$ étant une matrice diagonale dont les termes diagonaux sont les valeurs propres de $\mathbf{S}$. Si p est le nombre de valeurs propres de $\mathbf{S}$ plus grandes que ε_c , les tailles des matrices $\mathbf{T}$ et $\mathbf{s}$ deviennent $(n \times p)$ et $p \times p$ respectivement, après avoir rejeté les $n - p$ valeurs propres inférieures à la valeur de coupure ε_c . La matrice $\mathbf{D}$ définie par

$$\mathbf{D} = \mathbf{T} \mathbf{s}^{-\frac{1}{2}} \quad (3.23)$$

est de taille $(n \times p)$. Elle satisfait les relations

$$\mathbf{D}^t \mathbf{D} = \mathbf{s}^{-1}, \quad \mathbf{D}^t \mathbf{S} \mathbf{D} = \mathbf{1}. \quad (3.24)$$

Le problème aux valeurs propres (3.21) peut dès lors être réécrit comme suit :

$$\tilde{\mathbf{H}} \tilde{\Psi} = E \tilde{\Psi}, \quad (3.25)$$

avec

$$\tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{D}^t \mathbf{H} \mathbf{D}, \quad \tilde{\Psi} = \mathbf{D}^{-1} \Psi. \quad (3.26)$$

$\tilde{\mathbf{H}}$ est une matrice carrée de taille p et $\tilde{\Psi}$ un vecteur de même taille. En diagonalisant $\tilde{\mathbf{H}}$ par les techniques standards, on obtient les valeurs propres et les vecteurs propres de l'atome d'hélium.

3.3.5 Energies des états liés de l'atome d'hélium

Pour tester l'efficacité de la méthode et des fonctions de base utilisées pour résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps, nous avons calculé les énergies des états liés triplet de l'atome d'hélium. Les résultats sont contenus dans le tableau 3.1. Ils sont proches de ceux que l'on trouve dans la littérature même si les bases utilisées sont relativement petites. Les paramètres non-linéaires, les paires de moments angulaires, ainsi que les ensembles de fonctions sturmiennes que nous avons utilisés sont indiqués dans les tableaux 3.2 et 3.3.

n	$\theta = 0.0$	$\theta = 0.125$	$\theta = 0.15$	Valeurs de référence
états n^3S				
2	-2.175226390	-2.175226434 [2.28(7)]	-2.175226453 [7.26(8)]	-2.17522937824
3	-2.068688371	-2.068688383 [6.13(8)]	-2.068688389 [7.26(8)]	-2.06868906747
4	-2.036511816	-2.036511821 [2.44(8)]	-2.036511824 [2.98(8)]	-2.03651208310
5	-2.022618743	-2.022618745 [1.21(8)]	-2.022618747 [1.43(8)]	-2.02261887230
6	-2.015377380	-2.013377382 [6.81(9)]	-2.015377383 [8.81(9)]	-2.01537745299
7	-2.011129874	-2.011129876 [4.20(9)]	-2.011129877 [4.97(9)]	-2.01112991951
états n^3P				
2	-2.133152296	-2.133154349 [-4.36(6)]	-2.133155172 [-4.99(6)]	-2.13316419078
3	-2.058076550	-2.058076599 [3.94(7)]	-2.058076596 [5.01(7)]	-2.05808108427
4	-2.032322436	-2.032322389 [1.28(7)]	-2.32322358 [1.55(7)]	-2.03232435430
5	-2.020550209	-2.020550174 [4.48(8)]	-2.020550153 [5.19(8)]	-2.02055118726
6	-2.014207395	-2.014207372 [1.82(8)]	-2.014207358 [1.20(8)]	-2.01420795877
7	-2.010404606	-2.010404590 [8.40(9)]	-2.010404582 [8.54(9)]	-2.01040496001
états n^3D				
3	-2.055634979	-2.055634986 [-2.46(8)]	-2.055634990 [-2.88(8)]	-2.05563630945
4	-2.031288168	-2.031288172 [-1.00(8)]	-2.031288174 [-1.16(8)]	-2.03128884750
5	-2.020020654	-2.020020656 [-4.86(9)]	-2.020020657 [-5.59(9)]	-2.02002102745
6	-2.013901191	-2.013901193 [-2.70(9)]	-2.013901194 [-3.09(9)]	-2.01390141545
7	-2.010211961	-2.010211963 [-1.65(9)]	-2.010211963 [-1.88(9)]	-2.01021210596
8	-2.007817837	-2.007817838 [-1.08(9)]	-2.007817838 [-1.23(9)]	-2.00781793471
états n^3F				
4	-2.031255128	-2.031255129 [-2.56(10)]	-2.031255129 [-4.05(10)]	-2.03125516840
5	-2.020002929	-2.020002930 [-3.57(11)]	-2.020002930 [-1.28(10)]	-2.02000295738
6	-2.013890679	-2.013890680 [4.03(11)]	-2.013890681 [-1.33(11)]	-2.01389069835
7	-2.010205246	-2.010205246 [5.58(11)]	-2.010205247 [2.31(11)]	-2.01020525837
8	-2.007813296	-2.007813296 [5.27(11)]	-2.007813297 [3.16(11)]	-2.00781330454
9	-2.006173406	-2.006173406 [4.50(11)]	-2.006173407 [3.07(11)]	-2.00617341237
états n^3G				
5	-2.020000709	-2.020000709 [7.98(12)]	-2.020000710 [9.57(12)]	-2.02000071093
6	-2.013889344	-2.013889344 [8.83(12)]	-2.013889344 [1.02(12)]	-2.01388934542
7	-2.010204385	-2.010204385 [7.61(12)]	-2.010204386 [8.67(12)]	-2.01020438625
8	-2.007812711	-2.007812711 [6.14(12)]	-2.007812711 [6.94(12)]	-2.00781271151
9	-2.006172991	-2.006172991 [4.84(12)]	-2.006172992 [5.45(12)]	-2.00617299164
10	-2.005000112	-2.005000112 [3.83(12)]	-2.005000113 [4.30(12)]	-2.00500011278

TAB. 3.1 – Valeurs propres du hamiltonien atomique tourné associées aux états liés triplet de l'hélium. Les parties imaginaires de ces valeurs propres sont écrites entre des crochets où les nombres entre parenthèses représentent les puissances de 10 par lesquelles ces parties imaginaires doivent être divisées.

	κ_1	κ_2	$n1_{min}$	$n1_{max}$	$n2_{min}$	$n2_{max}$
1	2.000	1.450	1	5	1	15
2	2.000	0.400	1	5	1	15
3	2.000	0.200	1	5	1	15
4	2.000	1.300	1	5	1	15
5	2.000	0.020	1	5	1	24
6	2.000	0.075	1	5	1	24
7	2.000	0.200	1	5	1	24
8	2.000	0.200	1	5	1	24
9	2.000	0.075	1	5	1	24
10	2.000	0.020	1	5	1	24
11	2.000	0.100	1	5	1	24
12	2.000	0.075	1	5	1	24
13	2.000	0.090	1	5	1	15

TAB. 3.2 – Paramètres non-linéaires et indices sturmiens associés.

3.4 Résolution de l'ESDT par la méthode de Floquet.

L'ESDT pour l'atome d'hélium en interaction avec un champ laser est donnée par

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) = \mathcal{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t), \quad \mathcal{H} = H + H_G, \quad (3.27)$$

où H est le hamiltonien de l'atome isolé présenté dans la section précédente. H_G désigne le hamiltonien d'interaction entre le champ électromagnétique et l'atome. Dans les jauges longueur ($G \equiv L$) et vitesse ($G \equiv V$), le hamiltonien d'interaction $H_G(t)$ est donné par

$$H_L(t) = \vec{E}(t) \cdot (\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \quad H_V(t) = -i \vec{A}(t) \cdot (\vec{\nabla}_1 + \vec{\nabla}_2). \quad (3.28)$$

H_L et H_V sont écrits dans l'approximation dipolaire, et nous considérons un champ laser polarisé linéairement. Nous choisissons le potentiel vecteur tel que

$$\vec{A}(t) = \frac{E_0}{\omega} \sin(\omega t) \vec{e}_z \quad (3.29)$$

L	l_1	l_2	nombre de paires	Ensembles
0	0	0	3	1 2 13
0	1	1	3	1 2 13
0	2	2	3	1 2 13
0	3	3	3	1 2 13
1	0	1	3	4 2 13
1	1	2	3	4 2 13
1	2	3	3	4 2 13
1	3	4	3	4 2 13
2	0	2	3	4 2 13
2	1	1	3	4 2 13
2	1	3	3	4 2 13
2	2	2	3	4 2 13
3	0	3	3	7 5 6
3	1	2	3	7 5 6
3	1	4	3	7 5 6
3	2	3	3	7 5 6
4	0	4	3	8 9 10
4	1	3	3	8 9 10
4	1	5	3	8 9 10
4	2	2	3	8 9 10

TAB. 3.3 – Paires (11,l2) de moments angulaires utilisées.

où $\vec{u}_z$ représente le vecteur unitaire le long de l'axe de polarisation, qui est l'axe des z , et E_0 l'amplitude du champ.

Comme nous l'avons vu dans le premier chapitre, nous pouvons appliquer le *théorème de Floquet* sur $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)$ du moment que le champ laser est périodique dans le temps. Nous écrivons

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) = e^{-i\mathcal{E}t} \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t), \quad (3.30)$$

avec

$$\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) = \Phi\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t + \frac{2\pi}{\omega}\right), \quad (3.31)$$

c'est-à-dire que la fonction $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)$, appelée *fonction de Floquet*, est périodique dans le temps, et sa période vaut celle du champ, $\frac{2\pi}{\omega}$. Elle est fonction propre du hamiltonien de Floquet

$$\mathcal{H}_F \equiv H + H_G(t) - i\frac{\partial}{\partial t}. \quad (3.32)$$

Plus précisément, la fonction $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)$ vérifie l'équation

$$\left[H + H_G(t) - i\frac{\partial}{\partial t} \right] \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) = \mathcal{E} \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t). \quad (3.33)$$

Comme elle est périodique dans le temps, elle peut être développée en série de Fourier :

$$\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) = \sum_{N=-\infty}^{+\infty} e^{-iN\omega t} \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (3.34)$$

Procédant de la même façon que dans la section 1.6, nous aboutissons à l'équation

$$(H - N\omega)\Phi_N + V_+\Phi_{N-1} + V_-\Phi_{N+1} = \varepsilon\Phi_N \quad (3.35)$$

pour les composantes harmoniques $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)$. Les opérateurs V_+ et V_- sont donnés par

$$V_+ = -V_- \equiv \frac{E_0}{\omega} \left(\frac{\partial}{\partial z_1} + \frac{\partial}{\partial z_2} \right) \quad (3.36)$$

dans la jauge vitesse et

$$V_+ = V_- \equiv -\frac{E_0}{2}(z_1 + z_2) \quad (3.37)$$

dans la jauge longueur. En nous inspirant du développement (3.10) des fonctions d'onde spatiales du hamiltonien atomique H , nous pouvons écrire $\Phi_N(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ sous la forme

$$\Phi_N(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{L,M} \sum_{\lambda,l} \sum_s \sum_{\nu,n} \alpha_{\nu n}^{\lambda l} \phi_{N\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda LM} \mathcal{A} F_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda LM}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (3.38)$$

Des lors, les quasiénergies $\mathcal{E}$ sont les valeurs propres du système d'équations linéaires en les coefficients $\phi_{N\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda LM}$ que nous obtenons en projetant l'équation (3.35) sur les fonctions de base : nous multiplions à gauche cette équation par $\mathcal{A} F_{\kappa'_s k'_s \nu' n'}^{\lambda' L' M'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, puis nous intégrons dans tout l'espace. Nous obtenons finalement l'équation matricielle

$$\mathbf{A}\phi = \mathcal{E}\mathbf{B}\phi \quad (3.39)$$

où ϕ représente le vecteur colonne formé par les coefficients $\phi_{N\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda LM}$, $\mathbf{B}$ la matrice de recouvrement et $\mathbf{A}$ la *matrice de Floquet*. Le vecteur ϕ , tout comme les matrices $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$ sont partitionnés en blocs. Chaque bloc de Floquet est associé à une composante harmonique donnée. La figure 3.2 montre la structure en blocs de la matrice de Floquet $\mathbf{A}$. Cette matrice est constituée de blocs diagonaux $\mathcal{D}^N$ qui sont des matrices carrées représentant l'opérateur $\mathcal{D}^N \equiv H - N\omega\mathbf{1}$:

$$\mathcal{D}^N = \mathbf{H} - N\omega\mathbf{B} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{U} - N\omega\mathbf{B}, \quad N \in \mathbb{Z}, \quad (3.40)$$

et de blocs non diagonaux $\mathbf{V}_{pm}$ qui sont des matrices rectangulaires associées aux opérateurs $V_{\pm}$. Notons que l'opérateur $\mathcal{D}^N$ ne couple que les états de même N , tandis que les opérateurs V_{pm} couplent les états qui sont tels que $\Delta N = \mp 1$. En l'absence de rotation complexe ($\theta = 0$), les matrices $\mathcal{D}^N$ et $\mathbf{B}$ sont réelles et symétriques. La matrice $\mathbf{B}$ est même définie positive. Les matrices $\mathbf{V}_{pm}$ sont quant à elles réelles symétriques dans la jauge longueur et réelles antisymétriques dans la jauge vitesse. Il s'en suit que la matrice de Floquet $\mathbf{A}$ est réelle symétrique dans ce cas. Lorsque le paramètre de rotation complexe θ est différent de 0, ce qui est le cas quand on veut avoir les positions et les largeurs des résonances, la matrice de recouvrement $\mathbf{B}$ reste réelle, symétrique et définie positive. Les blocs diagonaux ($\mathcal{D}^N = \mathbf{H}_0(\theta) + \mathbf{U} - N\omega\mathbf{B}$) sont complexes

symétriques, tandis que les blocs non diagonaux ($\mathbf{V}_{\pm}(\theta) = e^{i\theta}\mathbf{V}_{\pm}$ dans la jauge longueur et $\mathbf{V}_{\pm}(\theta) = e^{-i\theta}\mathbf{V}_{\pm}$ dans la jauge vitesse) sont complexes symétriques (respectivement complexes antisymétriques) dans la jauge longueur (respectivement dans la jauge vitesse). La matrice de Floquet $\mathbf{A}_{\theta}$ est complexe symétrique.

$\ddots$	N-2	N-1	N	N+1	N+2	N+3	
	$\mathcal{D}^{(N-2)}$	$\mathbf{V}_{-}$					N-2
	$\mathbf{V}_{+}$	$\mathcal{D}^{(N-1)}$	$\mathbf{V}_{-}$				N-1
		$\mathbf{V}_{+}$	$\mathcal{D}^{(N)}$	$\mathbf{V}_{-}$			N
			$\mathbf{V}_{+}$	$\mathcal{D}^{(N+1)}$	$\mathbf{V}_{-}$		N+1
				$\mathbf{V}_{+}$	$\mathcal{D}^{(N+2)}$	$\mathbf{V}_{-}$	N+2
					$\mathbf{V}_{+}$	$\mathcal{D}^{(N+3)}$	N+3
							$\ddots$

FIG. 3.2 – Schéma de la structure en blocs du Hamiltonien de Floquet

Il importe de signaler que chaque bloc diagonal de la matrice de Floquet est partitionné en sous-blocs. Chaque sous-bloc est associé à un moment angulaire total L donné. La règle de sélection pour les sous-blocs des blocs diagonaux est donc $\Delta L = 0$. Les blocs non diagonaux sont eux aussi partitionnés en sous-blocs. La règle de sélection pour les sous-blocs non diagonaux est $\Delta L = \pm 1$.

Les figures 3.3 et 3.4 montrent la structure en blocs et sous-blocs de la matrice de Floquet dans les bases atomiques et sturmiennes respectivement.

Notons, pour terminer cette section, que les dimensions de la matrice de Floquet conduisant à une bonne convergence des valeurs et vecteurs propres sont en pratique très grandes, surtout quand on travaille avec plusieurs moments angulaires. D'où la nécessité de faire un bon choix de la méthode pour diagonaliser cette matrice, et ce pour réduire le temps de calcul. L'algorithme de Lanczos [Jenn92], que nous

décrivons dans la section suivante, convient pour notre cas. En effet, la matrice de Floquet $\mathcal{A}_\theta$ est très creuse (Fig. 3.2 et 3.3) et symétrique. Ses éléments non nuls sont situés dans une bande dont la largeur est très petite par rapport à la dimension totale de cette matrice. La matrice de recouvrement $\mathcal{B}$, réelle symétrique, est aussi creuse dans la mesure où elle est bloc diagonale dans la base sturmienne, et vaut la matrice unité dans la base atomique. De plus, le spectre du hamiltonien de Floquet étant périodique, de période $\hbar\omega$ nous n'avons pas besoin de tout le spectre pour calculer des observables telles que la probabilité d'ionisation, mais d'une seule zone de Floquet. En effet, si l'atome d'hélium est dans l'état $|\Phi_0\rangle$ au temps initial t_0 , la probabilité d'ionisation de l'atome à un instant ultérieur t_f est donnée par[Bu95] :

$$P_{ion}(t) = 1 - \sum_{i,K} \Re \left(\langle \overline{\psi_{i\theta}^K} | \Phi_{0\theta} \rangle^2 \right) \exp(2\Im(\varepsilon_i)t), \quad (3.41)$$

où la somme sur i s'étend sur tous les états propres liés de Floquet contenus dans une seule zone de Floquet, tandis que la somme sur K s'étend sur toutes les composantes harmoniques de chaque état propre intervenant dans la définition de $P_{ion}(t)$. t représente la durée de l'interaction entre l'atome et le champ laser : $t = t_f - t_0$.

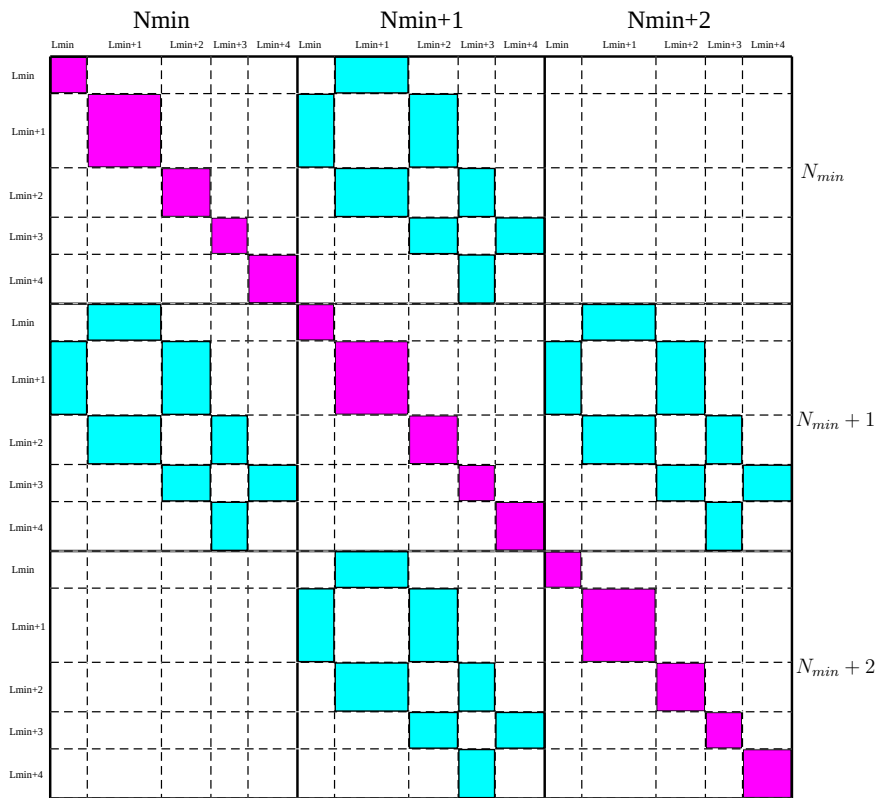


FIG. 3.3 – Structure en blocs et sous-blocs du hamiltonien de Floquet dans la base sturmienne.

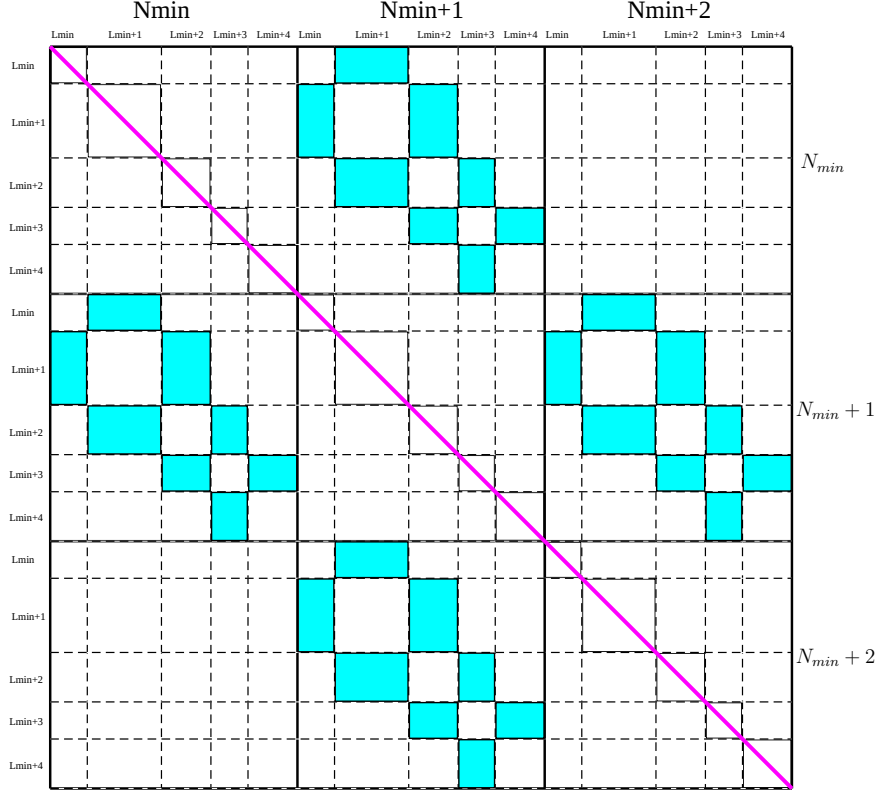


FIG. 3.4 – Structure en blocs et sous-blocs du hamiltonien de Floquet dans la base atomique.

3.5 L'algorithme de Lanczos

L'algorithme de Lanczos est une procédure itérative qui permet de trouver un certain nombre de valeurs propres d'une matrice situées dans le voisinage d'une position donnée sur l'axe des énergies, ainsi que les vecteurs propres correspondants. Cet algorithme fut à l'origine développé pour calculer un petit nombre de valeurs propres extrémales d'une matrice symétrique très grande [Lanc50, Par79]. Plus tard [Eri80], elle fut adaptée aux problèmes à valeurs propres généralisées,

$$\mathcal{A}_\theta \mathbf{x} = \mathcal{E} \mathcal{B} \mathbf{x}, \quad (3.42)$$

où $\mathcal{A}_\theta$ et $\mathcal{B}$ sont des matrices symétriques. Le problème (3.42) est équivalent au problème aux valeurs propres obtenu après multiplication à gauche par $\mathcal{A}_\theta^{-1}$:

$$\mathcal{A}_\theta^{-1}\mathcal{B}\mathbf{x} = \mu\mathbf{x}, \quad (3.43)$$

avec $\mu = \frac{1}{\varepsilon}$. L'algorithme de Lanczos permet de trouver les plus grandes valeurs de μ , c'est-à-dire les petites valeurs de ε . Comme les valeurs propres qui nous intéressent sont celles situées au voisinage d'une certaine énergie E_λ , nous devons, avant de diagonaliser la matrice de Floquet par la méthode de Lanczos, changer la matrice $\mathcal{A}_\theta$ à l'aide de la transformation

$$\mathcal{A}_\theta \rightarrow \mathcal{A}_\theta - E_\lambda \mathcal{B}. \quad (3.44)$$

L'algorithme de Lanczos consiste à transformer une matrice donnée en une matrice tridiagonale facile à diagonaliser numériquement. La matrice tridiagonale est de taille inférieure à la matrice initiale et ne décrit qu'un sous-espace de celle-ci. Soit

$$\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1 \quad \mathbf{y}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{y}_n]$$

une matrice orthogonale par rapport à $\mathcal{B}$ (c'est-à-dire $\mathbf{Y}^t \mathcal{B} \mathbf{Y} = \mathbf{1}$ qui transforme la matrice $\mathbf{M}_\theta \equiv \mathcal{A}_\theta^{-1} \mathcal{B}$ en une matrice tridiagonale $\mathbf{T}$ (c'est-à-dire $\mathbf{Y}^t \mathcal{A}_\theta^{-1} \mathcal{B} \mathbf{Y} = \mathbf{T}$ ou $\mathcal{A}_\theta^{-1} \mathcal{B} \mathbf{Y} = \mathbf{T} \mathbf{Y}$). Pour construire la matrice $\mathbf{Y}$, on choisit le premier vecteur $\mathbf{y}_1$ tel que $\mathbf{y}_1^t \mathcal{B} \mathbf{y}_1 = 1$. Les autres vecteurs sont obtenus à l'aide des relations de récurrence suivantes [Jenn92] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{M}\mathbf{y}_1 = \alpha_1 \mathbf{y}_1 + \beta_1 \mathbf{y}_2 \\ \mathbf{M}\mathbf{y}_2 = \beta_1 \mathbf{y}_1 + \alpha_2 \mathbf{y}_2 + \beta_2 \mathbf{y}_3 \\ \dots \dots \dots \\ \mathbf{M}\mathbf{y}_k = \beta_{k-1} \mathbf{y}_{k-1} + \alpha_k \mathbf{y}_k + \beta_k \mathbf{y}_{k+1} \\ \dots \dots \dots \\ \mathbf{M}\mathbf{y}_n = \beta_{n-1} \mathbf{y}_{n-1} + \alpha_n \mathbf{y}_n \end{array} \right. \quad (3.45)$$

avec $n < n_{tot}$, la dimension de la matrice de Floquet. Les vecteurs $\mathbf{y}_k$ sont orthogonaux par construction, et les coefficients β_k sont choisis de façon à normaliser ces vecteurs. Dans la base des $\mathbf{y}_k$, la matrice $\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B}$ prend la forme [Jenn92]

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & \alpha_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix}. \quad (3.46)$$

Dès lors, les plus grandes valeurs propres μ_i de (3.43) sont données par les valeurs propres de $\mathbf{T}$.

3.6 Stockage des matrices

Nous avons vu, dans la section 3.3, que les matrices de Floquet $\mathcal{A}$ et de recouvrement $\mathcal{B}$ sont très creuses. Ces deux matrices sont en plus symétriques. Nous n'avons donc pas besoin de stocker tous les éléments de ces matrices. Seuls les éléments matriciels non nuls situés dans le triangle inférieur sont stockés. Plus précisément, les parties réelles des éléments non nuls de $\mathcal{A}_\theta$ situés dans le triangle inférieur sont stockés dans une matrice bande $\mathbf{ar}$ de dimensions $(nlarg \times n_{tot})$ et les parties imaginaires correspondantes dans une matrice bande $\mathbf{ai}$ de mêmes dimensions que $\mathbf{ar}$. Les éléments non nuls du triangle inférieur de la matrice de recouvrement $\mathcal{B}$ sont stockés dans une matrice bande $\mathbf{d}$ de dimensions $(nlard \times n_{tot})$. Notons que dans la base atomique, nous avons $nlard = 1$ car la matrice de recouvrement est égale à la matrice unité.

Le nombre de bandes des matrices $\mathbf{ar}$ et $\mathbf{ai}$, c'est-à-dire $nlarg$, dépend du nombre de moment angulaire considérés, des dimensions des sous-blocs diagonaux de la matrice $\mathcal{A}_\theta$ et de la structure du hamiltonien d'interaction. Dans la base atomique par exemple, les blocs non nuls de la matrice du hamiltonien d'interaction sont pleins, et la valeur de $nlarg$ peut être calculée en se basant sur la figure 3.5, valable dans le cas particulier on tient compte de 5 moments angulaires. Dans la base sturmienne, les blocs non nuls de la matrice associée au hamiltonien d'interaction ne sont pas pleins, ce qui éventuellement conduit à la réduction de la valeur de $nlarg$. Dans tous les cas, la première ligne de $\mathbf{ar}$ et celle de $\mathbf{ai}$ correspond à la dernière bande (à compter de la diagonale principale de $\mathcal{A}_\theta$) de la matrice de Floquet $\mathcal{A}_\theta$ comprenant au moins un élément non nul. La dernière ligne de $\mathbf{ar}$ et celle de $\mathbf{ai}$ correspondent à la diagonale principale de $\mathcal{A}_\theta$. Le stockage des éléments matriciels

est donc fait de façon que les éléments de la diagonale principale soient placés dans la dernière ligne de la matrice bande :

$$d(nlard, i) = \mathcal{B}(i, i), \quad i = 1, n_{tot} \quad (3.47)$$

$$ar(nlarg, i) = \Re(\mathcal{A}_\theta(i, i)), \quad i = 1, n_{tot} \quad (3.48)$$

$$ai(nlarg, i) = \Im(\mathcal{A}(i, i)), \quad i = 1, n_{tot}. \quad (3.49)$$

Les éléments $\mathcal{A}_\theta(i, j)$ avec $i \geq j$ sont stockés dans $ar(nlarg + j - i, i)$ pour les parties réelles et dans $ai(nlarg + j - i, i)$ pour les parties imaginaires. De même, les éléments $\mathcal{B}(i, j)$, avec $i \geq j$ sont stockés dans $d(nlard + j - i, i)$.

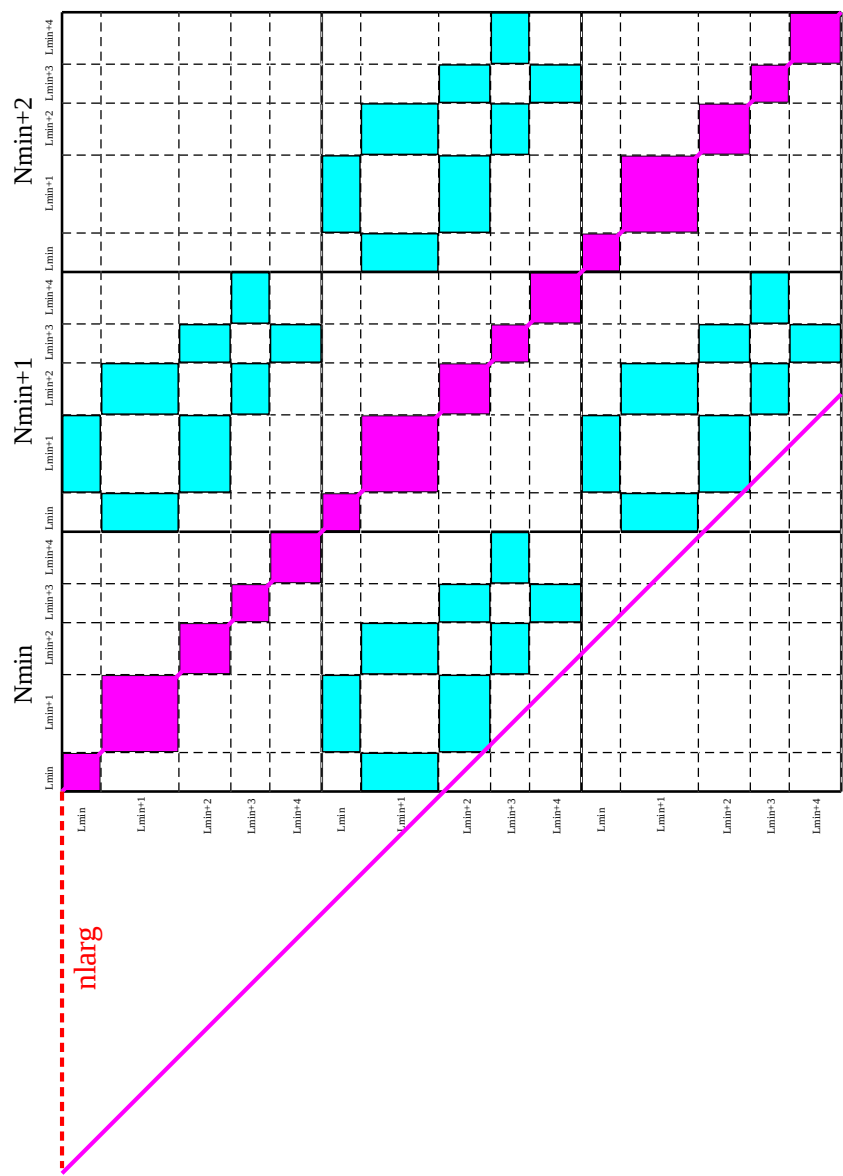


FIG. 3.5 – Détermination graphique de *nlarg*.

3.7 Résultats

3.7.1 Spectre du hamiltonien de Floquet tourné

Nous avons d'abord testé la méthode de Floquet sur l'atome d'hélium pour des dimensions de matrices assez petites pour pouvoir diagonaliser la matrice de Floquet tournée à l'aide des routines de la librairie Lapack. Notre objectif était de comparer les résultats ainsi obtenus avec ceux trouvés en utilisant l'algorithme de Lanczos, mais aussi vérifier que le spectre du hamiltonien est périodique, de période $\hbar\omega$. Les informations en rapport avec la base utilisée pour décrire la fonction d'onde spatiale sont celles contenues dans les tableaux 3.2 et 3.3. Nous avons pris $n_{2_{max}} = 6$ pour diminuer les dimensions. Le tableau 3.4 montre que les deux méthodes conduisent aux mêmes résultats.

Sur les figures 3.6 et 3.7, nous représentons, dans le plan complexe des énergies, une partie du spectre du hamiltonien de Floquet obtenu à l'aide de l'algorithme de Lanczos pour $\omega = 0.09 \text{ u.a}$ et deux valeurs du paramètre de rotation complexe θ . La diagonalisation du hamiltonien de Floquet a été effectuée plusieurs fois en variant le paramètre de déplacement E_λ , et ce pour éviter des trous dans le spectre. Nous avons pris 21 blocs de Floquet. Il est aisé de remarquer que le spectre est bien périodique, de période ω . De plus, les différentes coupures dans le continuum, qui n'est pas bien décrit à cause de la petitesse des bases utilisées pour décrire la fonction d'onde radiale du hamiltonien de l'atome libre, tournent vers le bas de 2θ . La figure 3.8 montre le spectre du hamiltonien de Floquet tourné de $\theta = 0.125 \text{ rad}$ lorsqu'on utilise des dimensions assez grandes (celles données dans le tableau 3.2) pour décrire la fonction d'onde spatiale. La densité d'états dans le continuum est cette fois-ci suffisamment grande pour que nous puissions observer la rotation des coupures conformément au théorème d'Aguilar-Balslev-Combes [[Agu71](#), [Bal71](#)] vu dans le premier chapitre.

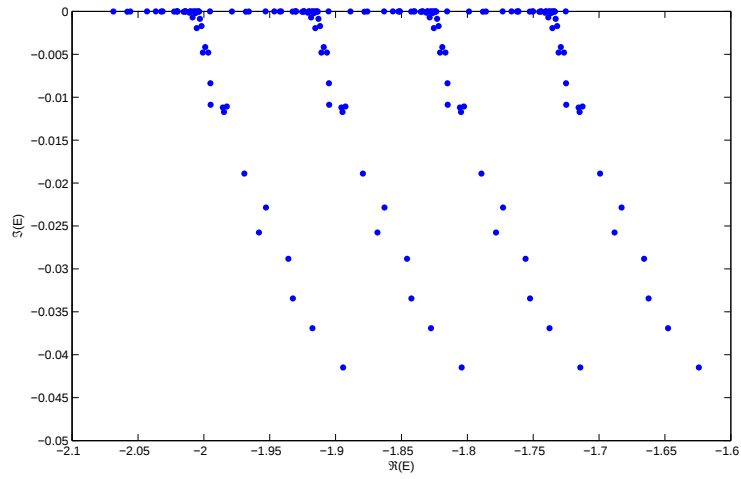


FIG. 3.6 – Spectre du hamiltonien de Floquet tourné de $\theta = 0.125 \text{ rad}$. Nous avons considéré 21 blocs de Floquet ($n_{ph} = -10 \cdots 10$). Les paramètres non-linéaires et les paires de moments angulaires sont les mêmes que dans les tableaux 3.2 et 3.3. Seulement, nous avons pris $n2_{max} = 6$.

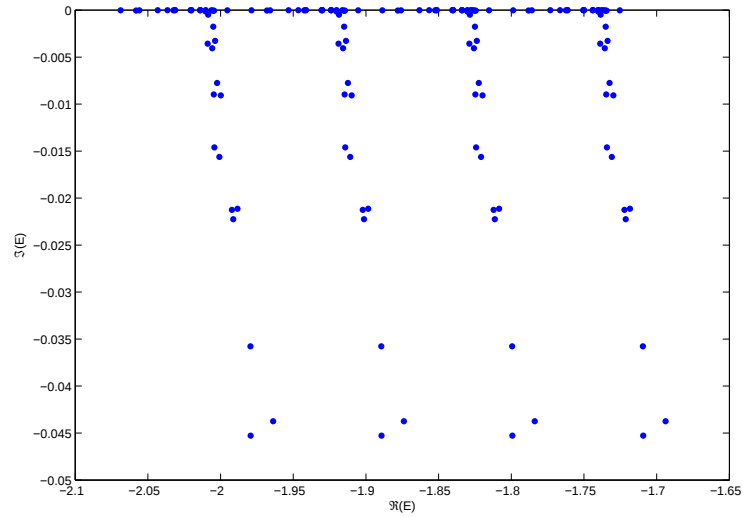


FIG. 3.7 – Même chose que pour la figure 3.6, à part que $\theta = 0.25 \text{ rad}$.

TAB. 3.4 – Spectre du hamiltonien de Floquet tourné de $\theta = 0.15 \text{ rad}$. A gauche : la diagonalisation a été effectuée à l'aide de la routine Lapack ZGEEV. A droite : la diagonalisation a été effectuée avec l'algorithme de Lanczos. Les blocs de Floquet sont au nombre de 7 ($n_{ph} = -3 \cdots 3$). $\omega = 0.106 \text{ u.a}$ $I_{max} = 10^{11} \text{ W/cm}^2$. Nous voyons que toutes les valeurs propres trouvées avec l'algorithme de Lanczos se trouvent parmi celles calculées avec la routine ZGEEV. Toutefois, il y a des trous dans le spectre du hamiltonien de Floquet calculé avec l'algorithme de Lanczos. Cela est dû au fait que, comme nous l'avons dit dans la section 3.5, l'algorithme de Lanczos ne calcule qu'un nombre limité de valeurs propres situées dans le voisinage d'une énergie donnée (-2.0 u.a dans ce calcul). On peut remédier à cette situation en diagonalisant plusieurs fois le hamiltonien de Floquet. Notons que la diagonalisation dure 50585 s avec la routine ZGEEV et seulement 331 s avec Lanczos, et ce sur une même machine (decci11).

$\Re(E)$	$\Im(E)$	$\Re(E)$	$\Im(E)$
-2.103094498536	-0.005713461288	-2.103094498534	-0.005713461287
-2.102676787271	-0.012371353424	-2.102676787272	-0.012371353425
-2.102061182765	-0.061983117084	-2.102061182766	-0.061983117084
-2.101890695494	-0.009942515897	-2.101890695494	-0.009942515899
-2.092544549484	-0.013344495888	-2.092544549484	-0.013344495888
-2.091721966878	-0.013954986492	-2.091721966878	-0.013954986492
-2.089401090822	-0.013206974345	-2.089401090822	-0.013206974344
-2.076768370110	-0.022454643155	-2.076768370109	-0.022454643155
-2.069324286041	-0.000008760594	-2.069324286040	-0.000008760594
-2.068708199956	-0.000012008753	-2.068708199956	-0.000012008753
-2.067628850514	-0.030327649068	-2.067628850514	-0.030327649068
-2.066082893137	-0.120733989649	-2.066082893137	-0.120733989647
-2.060508877473	-0.027257724010	-2.060508877473	-0.027257724010
-2.058105458175	-0.000025771986	-2.058105458175	-0.000025771986
-2.055739404512	-0.000006657917	-2.055739404512	-0.000006657918
-2.043772373372	-0.034380444563	-2.043772373372	-0.034380444562
-2.040785891151	-0.039919891252	-2.040785891151	-0.039919891251
-2.036698581030	-0.000003148195	-2.036698581030	-0.000003148195
-2.036520205798	-0.000005554137	-2.036520205798	-0.000005554137
-2.035457097159	-0.081673298859	-2.035457097160	-0.081673298861
-2.032376500061	-0.000009843728	-2.032376500061	-0.000009843728
-2.031458354025	-0.000003593606	-2.031458354025	-0.000003593606
-2.031319582680	-0.000000501955	-2.031319582680	-0.000000501955
-2.027135704051	-0.000004075248	-2.027135704051	-0.000004075248
-2.026202834526	-0.043999024622	-2.026202834526	-0.043999024622
-2.022609422041	-0.000016158380	-2.022609422040	-0.000016158380
-2.020609021715	-0.000005044959	-2.020609021715	-0.000005044959
-2.020066930363	-0.000000304254	-2.020066930363	-0.000000304254
-2.020053904363	-0.000001992687	-2.020053904363	-0.000001992687
-2.020030258330	-0.000000000404	-2.020030258329	-0.000000000404
-2.015346521672	-0.000048437853	-2.015346521671	-0.000048437853
-2.014265486178	-0.000002966402	-2.014265486178	-0.000002966402
-2.013955808068	-0.000003293083	-2.013955808068	-0.000003293083
-2.013954504712	-0.000000180597	-2.013954504712	-0.000000180597
-2.013918353570	-0.000000000376	-2.013918353570	-0.000000000376
-2.011012797280	-0.000171816861	-2.011012797280	-0.000171816861
-2.010454900623	-0.000001841275	-2.010454900623	-0.000001841275
-2.010268961712	-0.000000106877	-2.010268961712	-0.000000106877
-2.010268799902	-0.000012846498	-2.010268799902	-0.000012846498
-2.010233123144	-0.000000000295	-2.010233123144	-0.000000000295
-2.008738336907	-0.000766624494	-2.008738336907	-0.000766624494
-2.007971158225	-0.000000967267	-2.007971158225	-0.000000967267
-2.007876778172	-0.000000022420	-2.007876778172	-0.000000022420
-2.007861578908	-0.000061759442	-2.007861578908	-0.000061759442
-2.007841340565	-0.000000008215	-2.007841340565	-0.000000008215
-2.007373608956	0.000000491002	-2.007373608956	0.000000491002

$\Re(E)$	$\Im(E)$	$\Re(E)$	$\Im(E)$
-2.006423743105	-0.000308517271	-2.006423743105	-0.000308517271
-2.006236234360	0.000000336261	-2.006236234360	0.000000336261
-2.006218065231	-0.000000006349	-2.006218065231	-0.000000006349
-2.006201753134	-0.000000281830	-2.006201753134	-0.000000281830
-2.005929631586	-0.002323152429	-2.005929631586	-0.002323152429
-2.005607070133	-0.000000082320	-2.005607070133	-0.000000082320
-2.005059560362	0.000002482674	-2.005059560362	0.000002482674
-2.005029471960	-0.000002354607	-2.005029471960	-0.000002354607
-2.004832844629	-0.087547479881	-2.004832844629	-0.087547479880
-2.004184053272	-0.000031745253	-2.004184053272	-0.000031745253
-2.004165475743	-0.000015477401	-2.004165475742	-0.000015477401
-2.003574008534	-0.000046928628	-2.003574008534	-0.000046928628
-2.003485185007	0.000003908372	-2.003485185007	0.000003908372
-2.003288806245	-0.001085236537	-2.003288806245	-0.001085236537
-2.003135595101	0.000000025275	-2.003135595101	0.000000025275
-2.002984021557	-0.049535970589	-2.002984021557	-0.049535970589
-2.002887214698	0.000000560109	-2.002887214697	0.000000560109
-2.002633339988	0.000000002172	-2.002633339988	0.000000002172
-2.002367527769	0.000000046176	-2.002367527769	0.000000046176
-2.002168377267	-0.000000000228	-2.002168377267	-0.000000000228
-2.002076777723	-0.002054851057	-2.002076777723	-0.002054851057
-2.001921451285	-0.000000002478	-2.001921451285	-0.000000002478
-2.001765545514	-0.000000000113	-2.001765545514	-0.000000000112
-2.001543344229	-0.000000004774	-2.001543344229	-0.000000004774
-2.001423993485	0.000000000374	-2.001423993484	0.000000000374
-2.001312795806	-0.005702771330	-2.001312795806	-0.005702771330
-2.001215210231	-0.000000002884	-2.001215210230	-0.000000002884
-2.001127460978	0.000000000668	-2.001127460977	0.000000000668
-1.999484900431	-0.004943383359	-1.999484900430	-0.004943383359
-1.997094498536	-0.005713461288	-1.997094498536	-0.005713461288
-1.996676787280	-0.012371353434	-1.996676787280	-0.012371353434
-1.996061343666	-0.061983314512	-1.996061343666	-0.061983314512
-1.995890695496	-0.009942515888	-1.995890695496	-0.009942515888
-1.986544549484	-0.013344495888	-1.986544549484	-0.013344495887
-1.985721966882	-0.013954986490	-1.985721966881	-0.013954986490
-1.983401090822	-0.013206974345	-1.983401090822	-0.013206974345
-1.970768370137	-0.022454643128	-1.970768370137	-0.022454643128
-1.963324274581	-0.000008759331	-1.963324274581	-0.000008759331
-1.962708199947	-0.000012008753	-1.962708199947	-0.000012008753
-1.961628850491	-0.030327649119	-1.961628850491	-0.030327649119
-1.960270219663	-0.121029719846	-1.960270219663	-0.121029719844
-1.958193088650	-0.148614789365	-1.958193088649	-0.148614789365
-1.954508877481	-0.027257724016	-1.954508877481	-0.027257724015
-1.952105458137	-0.000025771984	-1.952105458137	-0.000025771984
-1.949739404445	-0.000006657917	-1.949739404445	-0.000006657918
-1.937772373375	-0.034380444562	-1.937772373376	-0.034380444562
-1.934785891152	-0.039919891261	-1.934785891152	-0.039919891262

$\Re(E)$	$\Im(E)$	$\Re(E)$	$\Im(E)$
-1.930698581030	-0.000003148195	-1.930698581030	-0.000003148194
-1.930520205756	-0.000005554137	-1.930520205756	-0.000005554136
-1.929457406079	-0.081673555434	-1.929457406079	-0.081673555436
-1.926376500056	-0.000009843728	-1.926376500055	-0.000009843729
-1.925458353185	-0.000003593603	-1.925458353184	-0.000003593603
-1.925319582674	-0.000000501955	-1.925319582673	-0.000000501955
-1.922993044657	-0.153360945642	-1.922993044655	-0.153360945644
-1.921135672387	-0.000004075092	-1.921135672389	-0.000004075095
-1.920202834492	-0.043999024652	-1.920202834492	-0.043999024653
-1.916609421985	-0.000016158379	-1.916609421985	-0.000016158378
-1.914609021712	-0.000005044959	-1.914609021712	-0.000005044959
-1.914066930359	-0.000000304254		
-1.914053904227	-0.000001992685		
-1.914030258329	-0.000000000404		
-1.909346521667	-0.000048437853		
-1.908265486176	-0.000002966402		
-1.907955808043	-0.000003293083		
-1.907954504709	-0.000000180597		
-1.907918353570	-0.000000000376		
-1.905012797278	-0.000171816861		
-1.904454900621	-0.000001841275		
-1.904268961710	-0.000000106877		
-1.904268799891	-0.000012846498		
-1.904233123144	-0.000000000295		
-1.902738336906	-0.000766624496		
-1.901971158224	-0.000000967267		
-1.901876778170	-0.000000022420		
-1.901861578900	-0.000061759442		
-1.901841340565	-0.000000008215		
-1.901373608957	0.0000000491002		
-1.900423743099	-0.000308517277		
-1.900236234358	0.000000336261		
-1.900218065230	-0.000000006349		
-1.900201753133	-0.000000281830		
-1.899929631584	-0.002323152431		
-1.899607070134	-0.000000082321		
-1.899059560361	0.000002482675		
-1.899029471960	-0.000002354607		
-1.898832787121	-0.087547559922	-1.898832787118	-0.087547559918
-1.898184053271	-0.000031745252		
-1.898165475742	-0.000015477401		
-1.897574008534	-0.000046928628		
-1.897485185007	0.000003908372		
-1.897288806243	-0.001085236540		
-1.897135595101	0.000000025275		
-1.896984021551	-0.049535970579	-1.896984021550	-0.049535970578
-1.896887214697	0.000000560109		

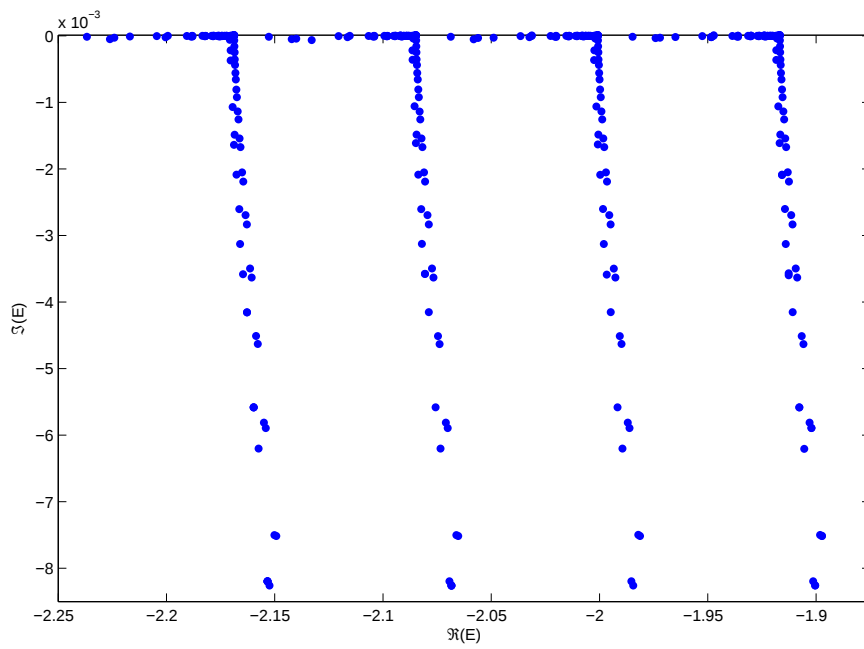


FIG. 3.8 – Spectre du hamiltonien de Floquet tourné de $\theta = 0.125 \text{ rad}$. Nous avons travaillé avec 15 blocs de Floquet ($n_{ph} = -7 \dots 7$). Les paramètres non-linéaires et les paires de moments angulaires sont les mêmes que dans les tableaux 3.2 et 3.3.

3.7.2 Stabilité de l'algorithme de Lanczos

Non seulement il faut que le spectre du hamiltonien de Floquet soit périodique pour être sûr que notre code fonctionne bien, mais aussi il faut qu'il soit stable par rapport au paramètre de déplacement E_λ et au paramètre de rotation complexe θ . L'algorithme de Lanczos est stable par rapport à E_λ si le spectre du hamiltonien de Floquet obtenu à l'aide de cet algorithme est indépendant de E_λ . Nous avons fait des tests en rapport avec ça mais avec de petites bases (voir tableaux 3.3 et 3.2 où il faut prendre $n2_{max} = 6$). Les résultats trouvés sont contenus dans le tableau 3.5. Pour construire ce tableau, nous avons diagonalisé la matrice de Floquet 6 fois en changeant la valeur de E_λ . Nous avons ensuite analysé les valeurs propres obtenues. L'objectif était de détecter les énergies qui apparaissent au moins deux fois dans le spectre total obtenu. Ces énergies (qui sont répétées) sont évidemment associées à deux valeurs différentes du paramètre de déplacement et doivent être dans le voisinage commun de ces deux valeurs. L'indice i représente le numéro de l'énergie dans la liste des valeurs propres obtenues, k_{min} et k_{max} la valeur minimale et la valeur maximale du nombre de photons. Δ_{max} représente la plus grande valeur absolue des différences entre les parties réelles et les parties imaginaires de deux énergies les plus proches possibles, mais associées à deux valeurs différentes de E_λ . Nous voyons qu'il existe une stabilité dans nos résultats, mais qui n'est pas parfaite. Nous pensons qu'en utilisant des bases suffisamment grandes, nous aurons une très bonne stabilité.

i	$ \Delta_{max} $	k_{min}	k_{max}
151	0.187867E-10	-1	1
155	0.306336E-10	-1	2
193	0.348149E-09	-1	3
194	0.372061E-09	-1	4
196	0.490320E-09	-1	5
98	0.487018E-10	-2	5
91	0.438579E-09	-4	5
87	0.218523E-10	-6	11
115	0.324850E-10	-10	15
284	0.170928E-10	-16	23

TAB. 3.5 – Etude de la stabilité de l'algorithme de Lanczos

Conclusion

Notre travail a porté sur des développements méthodologiques relatifs à l'interaction lumière-matière. Le fil conducteur de ce travail était d'étudier les avantages de l'utilisation de hamiltoniens non hermitiques (c'est-à-dire ayant subi une rotation complexe des coordonnées radiales) dans les problèmes de physique relatifs à l'interaction atome-photons. Parmi les problèmes traités figurent :

1. le calcul des résonances à partir du modèle de Friedrichs-Fano tourné.
2. le calcul, lors de l'ionisation d'un atome par une impulsion laser intense, de la distribution en énergie des électrons émis lorsque le continuum est tourné.
3. étude de l'ionisation multiphotonique d'atomes à l'aide de la méthode de Floquet. Cette méthode nécessite l'utilisation de la rotation complexe des coordonnées.
4. la résolution, par des méthodes dépendant du temps, de l'ESDT associée à un système atomique en interaction avec un champ laser.

Les différentes méthodes présentées ont dans un premier temps été appliquées sur deux systèmes atomiques simples, à savoir l'atome d'hydrogène et un modèle fondé sur l'utilisation du potentiel de Pöschl-Teller. L'application de la méthode de dilatation complexe à l'atome d'hydrogène en présence d'un champ laser a montré qu'il est relativement facile de calculer le spectre en énergie du photoélectron même si les énergies des états du continuum deviennent complexes. Mais ce calcul demande l'utilisation des méthodes d'accélération de la convergence, les approximants de Padé dans notre cas. Ces derniers permettent

non seulement d'accélérer la convergence, mais aussi de définir une norme qui, pour des temps longs, représente la probabilité pour le système de ne pas se fragmenter.

Le modèle atomique que nous avons développé nous a été très utile. Nous nous en sommes servis pour :

- tester une nouvelle méthode de propagation dans le temps de la fonction d'onde, à savoir la méthode de Fatunla. Nous avons montré que cette méthode est rapide même pour des problèmes “raides”.
- tester la méthode de Floquet dans l'étude des états induits par laser. A ce sujet, nous avons montré qu'il est possible de suivre les pôles associés à ces états dans le plan complexe des énergies.
- tester le modèle de Friedrichs-Fano tourné dans le calcul des résonances.

Dans le dernier chapitre de notre travail, nous avons abordé le problème de l'ionisation simple à trois photons de l'atome d'hélium initialement dans un état excité, et ce suite à une expérience qui a été réalisée à l'UCL et dont nous voudrions élucider les résultats. C'est un problème de grande taille qui nécessite d'une part le calcul de la structure atomique de l'hélium, et d'autre part l'utilisation de la méthode de Floquet. Le calcul de la structure atomique de l'hélium a été faite à l'aide de la méthode développée par Lagmago[Lag99]. L'introduction de la méthode de Floquet conduit à des matrices de très grandes tailles dont la diagonalisation nécessite beaucoup de temps et d'espace mémoire. Pour réduire le temps de calcul, ainsi que l'espace mémoire utilisé, nous avons fait appel à l'algorithme de Lanczos. Malgré cela, le temps de calcul reste relativement élevé suite à toute une série de tests devant être faits pour nous rassurer que notre code fonctionne bien. Ces tests portent sur :

- la densité d'états atomiques dans le continuum,
- la stabilité des résultats par rapport au paramètre de déplacement,
- la stabilité des résultats par rapport au paramètre de rotation complexe θ ,
- la sensibilité des résultats à la variation du nombre de blocs de Floquet,
- la périodicité du spectre du hamiltonien de Floquet.

Par ailleurs, pour avoir une courbe des probabilités d'ionisation en fonction de la fréquence angulaire du laser ω , nous devons diagonaliser des matrices de grande taille, et ce, plusieurs fois pour chaque valeur de

ω . Pour toutes ces raisons, les résultats présentés dans ce travail ne sont que préliminaires.

Annexe A

Résolution analytique de l'équation

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - U_0 \operatorname{sech}^2(\alpha x) \right] \psi = E \psi .$$

Cette annexe est consacrée à la résolution analytique de l'équation de Schrödinger

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - U_0 \operatorname{sech}^2(\alpha x) \right] \psi = E \psi \quad (\text{A.1})$$

dans le cas où U_0 et α sont des réels positifs quelconques. La forme de la solution $\psi(x)$ dépend des changements de variable opérés pour résoudre cette équation. Nous présentons ici deux méthodes de résolution dont l'une conduit aux fonctions sturmiennes pour le potentiel de Pöschl-Teller.

A.1 Première méthode.

Posons $z = \alpha x$. Alors l'équation (A.1) devient :

$$\psi'' + [\epsilon + \nu \operatorname{sech}^2(z)] \psi = 0 , \quad (\text{A.2})$$

où le symbole “ ’ ” indique la dérivation par rapport à z ,

$$\epsilon = \frac{2E}{\alpha^2} \quad (\text{A.3})$$

et

$$\nu = \frac{2U_0}{\alpha^2} > 0. \quad (\text{A.4})$$

En vue de simplifier le problème, nous posons

$$\psi = A \operatorname{sech}^\beta(z) \cdot y(z), \quad (\text{A.5})$$

où A est une constante arbitraire. β est défini par l'équation

$$\beta^2 = -\epsilon = -\frac{2E}{\alpha^2}. \quad (\text{A.6})$$

Ce changement de variable conduit à l'équation

$$y'' - 2\beta \tanh(z) \cdot y' + (\nu - \beta^2 - \beta) \operatorname{sech}^2(z) \cdot y = 0. \quad (\text{A.7})$$

Si maintenant nous posons

$$u = \frac{1}{2}(1 - \tanh(z)) = \frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}}, \quad (\text{A.8})$$

nous aboutissons à l'équation

$$u(1-u) \frac{d^2 y}{du^2} + [1 + \beta - 2(1 + \beta)u] \frac{dy}{du} + (\nu - \beta^2 - \beta) \cdot y = 0. \quad (\text{A.9})$$

L'équation (A.9) peut être écrite sous la forme standard de l'équation hypergéométrique

$$u(1-u) \frac{d^2 y}{du^2} + [c - (a + b + 1)u] \frac{dy}{du} - aby = 0. \quad (\text{A.10})$$

Il suffit de prendre

$$\begin{cases} c = 1 + \beta \\ a + b + 1 = 2(1 + \beta) \\ ab = \beta^2 + \beta - \nu \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

A partir de ce système, nous obtenons

$$\begin{cases} a = \frac{1}{2} + \beta + \frac{1}{2}\sqrt{1 + 4\nu} = \frac{1}{2} + \beta + \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} \\ b = \frac{1}{2} + \beta - \frac{1}{2}\sqrt{1 + 4\nu} = \frac{1}{2} + \beta - \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} \\ c = 1 + \beta \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

La solution de l'équation (A.10), qui reste finie en $u = 0$, c'est-à-dire lorsque $z \rightarrow +\infty$, est [Abr70] :

$$y = {}_2F_1(a, b; c; u) = 1 + \frac{ab}{c}u + \dots \quad (\text{A.13})$$

Si $z \rightarrow +\infty$, alors $u \rightarrow 0$ et donc $y \rightarrow 1$. Par suite, (A.5) devient :

$$\psi(x) = A \operatorname{sech}^\beta(z) {}_2F_1(a, b; c; u) \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} A 2^\beta e^{-\beta z}. \quad (\text{A.14})$$

On peut montrer [Lam80] que

$$\begin{aligned} \psi(x) = A \operatorname{sech}^\beta(z) {}_2F_1(a, b; c; u) \xrightarrow{z \rightarrow -\infty} A 2^\beta & \left[\frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} e^{\beta z} \right. \\ & \left. + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} e^{-\beta z} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

a , b , et c sont donnés par le système (A.12), $z = \alpha x$, $\alpha > 0$.

Les états liés

L'équation (A.15) montre que la fonction d'onde $\psi(x)$ devient infinie en $u = 1$ ($z \rightarrow -\infty$), à moins que la quantité

$$b = \frac{1}{2} + \beta - \frac{1}{2}\sqrt{1+4\nu} = \frac{1}{2} + \beta - \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} \quad (\text{A.16})$$

soit un entier négatif, ce qui revient à dire que

$$\beta = \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} - n, \quad (\text{A.17})$$

où n est un nombre entier plus petit que $\sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2}$. Dans ce cas, la quantité $\Gamma(b)$ apparaissant dans l'expression (A.15) est infinie, et le coefficient de $e^{-\beta z}$ devient nul. Les valeurs discrètes de ε sont, par suite, données par l'équation

$$\varepsilon_n = - \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) - \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} \right]^2; \quad n=0, 1, 2, \dots; \quad n < \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} \quad (\text{A.18})$$

Pour ces valeurs de ε , la fonction propre $\psi(x)$ est de carré sommable.

En résumé, la fonction propre $\psi(x)$, solution de l'équation de Schrödinger

$$-\frac{1}{2}\psi'' - U_0\operatorname{sech}^2(\alpha x)\psi = E\psi,$$

est donnée par

$$\psi(x)=A\operatorname{sech}^\beta(\alpha x)\cdot {}_2F_1\left(\frac{1}{2}+\beta+\sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2}+\frac{1}{4}}, \frac{1}{2}+\beta-\sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2}+\frac{1}{4}}; 1+\beta; u(x)\right) \quad (\text{A.19})$$

où

$$\beta^2 = -\varepsilon = \frac{-2E}{\alpha^2}; \quad u(x) = \frac{1}{2}(1 - \tanh(\alpha x)) = \frac{e^{-\alpha x}}{e^{\alpha x} + e^{-\alpha x}}. \quad (\text{A.20})$$

Cette solution est de carré sommable *ssi*

$$\beta = \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} - n,$$

où $n \in \mathbb{N}$ et $n < \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2}$. Les valeurs discrètes de ε sont données par l'équation (A.18). On en déduit les valeurs propres de l'énergie des états liés :

$$E_n = -\frac{\alpha^2}{2} \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) - \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} \right]^2; \quad n=0, 1, 2, \dots; \quad n < \sqrt{\frac{2U_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} \quad (\text{A.21})$$

La figure ci-dessous montre le comportement du potentiel de Pöschl-Teller en fonction des paramètres U_0 et α . Nous constatons que si nous fixons U_0 et que nous varions α ; l'épaisseur du puits, et par conséquent le nombre d'états liés, augmentent lorsque α diminue. Nous constatons aussi que la profondeur du puits et le nombre d'états liés augmentent lorsque U_0 augmente, α étant fixé. Le fait que le nombre d'états liés augmente lorsque α diminue ou U_0 augmente peut être démontré à partir de l'équation (A.21). Nous avons vérifié, numériquement, que la densité d'états dans le continuum augmente quand α diminue.

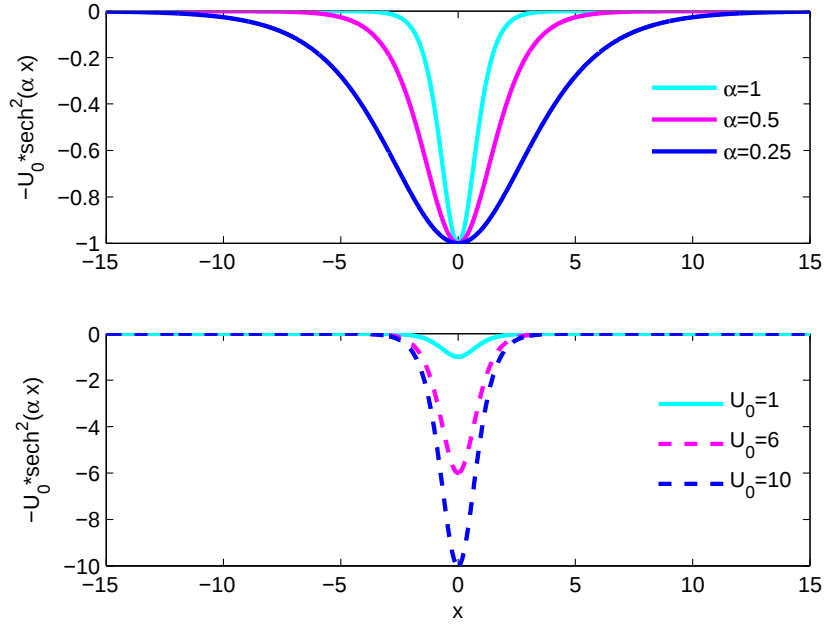


FIG. A.1 – Graphe du potentiel de Pöschl-Teller. En haut : U_0 est fixé à 1 et on fait varier la valeur de α . En bas : on prend $\alpha = 1$ et on fait varier U_0 .

A.2 Deuxième méthode : les fonctions sturmiennes

Revenons à l'équation (A.1) et écrivons-la sous la forme

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [2E + 2U_0 \operatorname{sech}^2(\alpha x)] \psi = 0. \quad (\text{A.22})$$

En faisant le changement de variable

$$s = \tanh(\alpha x), \quad (\text{A.23})$$

nous obtenons

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -2\alpha^2 s(1-s^2)\psi'(s) + \alpha^2(1-s^2)^2\psi''(s), \quad \operatorname{sech}^2(\alpha x) = 1-s^2. \quad (\text{A.24})$$

Substituant (A.24) dans (A.22), nous aboutissons à l'équation

$$[(1-s^2)\psi'(s)]' + \left[\frac{2U_0}{\alpha^2} - \frac{\frac{-2E}{\alpha^2}}{1-s^2}\right]\psi(s) = 0. \quad (\text{A.25})$$

Considérons le cas particulier où α et U_0 sont tels que

$$\frac{2U_0}{\alpha^2} = l(l+1), \quad l \in \mathbb{N}_0.$$

Dans ce cas, l'équation (A.25) devient

$$[(1-s^2)\psi'(s)]' + \left[l(l+1) - \frac{\mu^2}{1-s^2}\right]\psi(s) = 0, \quad (\text{A.26})$$

où nous avons posé $\mu^2 = \frac{-2E}{\alpha^2}$. Cette équation a la forme de l'équation différentielle de Legendre associée qui est une équation de Sturm-Liouville. Ses solutions sont, par conséquent, les fonctions de Legendre associées :

$$\psi(s) = P_l^\mu(s). \quad (\text{A.27})$$

Elles se réduisent à des polynômes de Legendre associés si $\mu \in \mathbb{N}$. Dans ce cas, la solution de l'équation (A.1) peut être écrite sous la forme

$$\psi(x) = N_{lm} P_l^m(\tanh \alpha x) \equiv \psi_l^m(x); \quad m, l \in \mathbb{N}, \quad m \leq l, \quad (\text{A.28})$$

avec

$$m^2 = \frac{-2E}{\alpha^2}; \quad l(l+1) = \frac{2U_0}{\alpha^2}. \quad (\text{A.29})$$

N_{lm} est une constante de normalisation. Elle est définie par la condition de normalisation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [\psi_l^m(x)]^2 dx = N_{lm}^2 \int_{-\infty}^{+\infty} [P_l^m(\tanh(\alpha x))]^2 dx = 1. \quad (\text{A.30})$$

Compte tenu de la relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre associés $P_l^m(s)$ pour l fixé,

$$\int_{-1}^1 \frac{P_l^m(s) P_l^n(s)}{1-s^2} ds = \begin{cases} 0 & \text{si } m \neq n \\ \frac{(l+m)!}{m(l-m)!} & \text{si } m = n \neq 0 \\ \infty & \text{si } m = n = 0 \end{cases}, \quad (\text{A.31})$$

nous avons

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} [P_l^m(\tanh(\alpha x))]^2 dx &= \frac{1}{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{[P_l^m(s)]^2}{1-s^2} ds \\ &= \frac{1}{\alpha} \frac{(l+m)!}{m(l-m)!} \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

et

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{\alpha m(l-m)!}{(l+m)!}}. \quad (\text{A.33})$$

Annexe B

Calcul d'éléments matriciels pour le modèle atomique

B.1 La matrice de recouvrement S

Les éléments de la matrice de recouvrement sont définis par

$$S_{lk} = \langle \psi_l^1 | \psi_k^1 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_l^1(x) \psi_k^1(x) \quad (\text{B.1})$$

avec

$$\psi_l^1(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{l(l+1)}} P_l^1(\tanh(\alpha x)) \quad (\text{B.2})$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned} S_{lk} &= \frac{\alpha}{\sqrt{lk(l+1)(k+1)}} \int_{-\infty}^{\infty} P_l^1(\tanh(\alpha x)) P_k^1(\tanh(\alpha x)) dx \\ &= \sqrt{\frac{1}{lk(l+1)(k+1)}} \int_{-1}^1 \frac{P_l^1(s) P_k^1(s)}{1-s^2} ds ; s = \tanh(\alpha x) . (\text{B.3}) \end{aligned}$$

Sachant que[Rash86]

$$\int_{-1}^1 \frac{P_l^m(s) P_k^m(s)}{1-s^2} ds = \begin{cases} 0 & \text{si } (l+k) \text{ est impair} \\ \frac{1}{m} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} & (l+k) \text{ est impair et } k \geq m > 0, \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

nous avons

$$S_{lk} = \begin{cases} 0 & \text{si } (l+k) \text{ est impair} \\ \sqrt{\frac{l(l+1)}{k(k+1)}} & \text{si } (l+k) \text{ est pair et } k \geq l \geq 1 \end{cases} \quad (\text{B.5})$$

L'équation (B.5) définit les éléments du triangle supérieur de la matrice de recouvrement $\mathbf{S}$. Pour avoir les éléments du triangle inférieur, on exploite la propriété de symétrie de la matrice $\mathbf{S}$: $S_{kl} = S_{lk}$.

B.2 Matrice associée au potentiel de Pöschl-Teller

Les éléments de la matrice $\mathbf{U}$ associée au potentiel de Pöschl-Teller sont définis par

$$\begin{aligned} U_{lk} &= -U_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_l^1(x) \operatorname{sech}^2(\alpha x) \psi_k^1(x) \\ &= \frac{-U_0 \alpha}{\sqrt{l k (l+1)(k+1)}} \int_{-\infty}^{\infty} P_l^1(\tanh(\alpha x)) P_k^1(\tanh(\alpha x)) \\ &\quad \times (1 - \tanh^2(\alpha x)) dx. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

En effectuant le changement de variable $s = \tanh(\alpha x)$, on obtient

$$\begin{aligned} U_{lk} &= -\frac{U_0}{\sqrt{l k (l+1)(k+1)}} \int_{-1}^1 P_l^1(s) P_k^1(s) ds \\ &= -U_0 \frac{2}{2l+1} \delta_{kl} \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

car [Gra07]

$$\int_{-1}^1 P_l^m(s) P_k^m(s) ds = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{kl} \quad (\text{B.8})$$

B.3 Matrice associée à l'opérateur énergie cinétique E_c

$$E_{C,lk} = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_l^1(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi_k^1(x) dx. \quad (\text{B.9})$$

A partir de l'équation (1.61),

$$\frac{d^2 \psi_l^m}{dx^2} + [\alpha^2 l(l+1) \text{sech}^2(\alpha x) - \alpha^2 m^2] \psi_l^m = 0,$$

nous tirons

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_k^1(x) = -\alpha^2 k(k+1) \text{sech}^2(\alpha x) \cdot \psi_k^1(x) + \alpha^2 \psi_k^1(x). \quad (\text{B.10})$$

D'où

$$\begin{aligned} E_{C,lk} &= -\frac{1}{2} \left\{ -\alpha^2 k(k+1) \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_l^1(x) \text{sech}^2(\alpha x) \psi_k^1(x) \right. \\ &\quad \left. + \alpha^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_l^1(x) \psi_k^1(x) \right\} = \frac{\alpha^2 l(l+1)}{2l+1} \delta_{kl} - \frac{\alpha^2}{2} S_{lk} \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

B.4 Matrice de l'opérateur dipolaire dans la jauge vitesse

Le calcul de la matrice du hamiltonien d'interaction dans la jauge vitesse nécessite l'évaluation des intégrales définies

$$d_{lk}^V \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_l^1(x) \frac{d}{dx} \psi_k^1(x) dx, \quad (\text{B.12})$$

ou bien

$$d_{lk}^V = \frac{\alpha}{\sqrt{l k (l+1)(k+1)}} \int_{-\infty}^{\infty} P_l^1(\tanh(\alpha x)) \frac{d}{dx} P_k^1(\tanh(\alpha x)) dx. \quad (\text{B.13})$$

Posons $s = \tanh(\alpha x)$. Alors, nous avons

$$dx = \frac{ds}{\alpha(1-s^2)}, \quad (\text{B.14})$$

$$\frac{d}{dx} P_k^1(\tanh(\alpha x)) = \alpha(1-s^2) \frac{dP_k^1(s)}{ds}. \quad (\text{B.15})$$

A partir de l'équation[[Gra07](#)]

$$(1-x^2) \frac{dP_\nu^\mu(x)}{dx} = (\nu+1)xP_\nu^\mu(x) - (\nu-\mu+1)P_{\nu+1}^\mu(x), \quad (\text{B.16})$$

nous obtenons

$$(1-s^2) \frac{dP_k^1(s)}{ds} = (k+1)sP_k^1(s) - kP_{k+1}^1(s) \quad (\text{B.17})$$

et donc

$$\frac{d}{dx} P_k^1(\tanh(\alpha x)) = \alpha [(k+1)sP_k^1(s) - kP_{k+1}^1(s)]. \quad (\text{B.18})$$

De la relation[[Gra07](#)]

$$(2\nu+1)xP_\nu^\mu(x) = (\nu-\mu+1)P_{\nu+1}^\mu(x) + (\nu+\mu)P_{\nu-1}^\mu(x), \quad (\text{B.19})$$

nous tirons

$$sP_k^1(s) = \frac{1}{2k+1} [kP_{k+1}^1(s) + (k+1)P_{k-1}^1(s)]. \quad (\text{B.20})$$

Il s'ensuit que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} P_k^1(\tanh(\alpha x)) &= \alpha \left[\frac{k(k+1)}{2k+1} P_{k+1}^1(s) + \frac{(k+1)^2}{2k+1} P_{k-1}^1(s) \right] \\ &\quad - kP_{k+1}^1(s) \\ &= \alpha \left[-\frac{k^2}{2k+1} P_{k+1}^1(s) + \frac{(k+1)^2}{2k+1} P_{k-1}^1(s) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Si nous insérons (B.14) et (B.21) dans (B.13), nous obtenons

$$d_{lk}^V = \frac{\alpha}{\sqrt{l k (l+1)(k+1)}} \left\{ -\frac{k^2}{2k+1} \int_{-1}^1 \frac{P_l^1(s) P_{k+1}^1(s)}{1-s^2} ds + \frac{(k+1)^2}{2k+1} \int_{-1}^1 \frac{P_l^1(s) P_{k-1}^1(s)}{1-s^2} ds \right\} \quad (\text{B.22})$$

Les deux intégrales contenues dans cette équation ont même forme que l'intégrale définie (B.4). Nous avons donc finalement

$$d_{lk}^V = \begin{cases} 0 & \text{si } (l+k) \text{ est pair} \\ \frac{\alpha}{\sqrt{l k (l+1)(k+1)}} \left[-\frac{k^2}{2k+1} l(l+1) + \frac{(k+1)^2}{2k+1} l(l+1) \right] & \text{si } (l+k) \text{ est impair et } k > l \\ \frac{\alpha}{\sqrt{l k (l+1)(k+1)}} \left[-\frac{k^2}{2k+1} (k+1)(k+2) + \frac{(k+1)^2}{2k+1} k(k-1) \right] & \text{si } (l+k) \text{ est impair et } k < l \end{cases} \quad (\text{B.23})$$

B.5 Matrice du hamiltonien d'interaction dans la jauge longueur

Le calcul des éléments de la matrice dipolaire dans la jauge longueur fait intervenir les intégrales

$$d_{lk}^L \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_l^1(x) x \psi_k^1(x) ; l \in \mathbb{N} \text{ et } k \in \mathbb{N}. \quad (\text{B.24})$$

Autrement-dit,

$$\begin{aligned} d_{lk}^L &= \frac{1}{\sqrt{l k (l+1)(k+1)}} \int_{-\infty}^{+\infty} P_l^1(\tanh(\alpha x)) (\alpha x) P_k^1(\tanh(\alpha x)) dx \\ &= \frac{1}{\alpha c_{lk}} \int_{-1}^1 \operatorname{arctanh}(s) \frac{P_l^1(s) P_k^1(s)}{1-s^2} ds \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

où nous avons posé $s = \tanh(\alpha x)$ et

$$c_{lk} = \frac{1}{\sqrt{l k (l+1)(k+1)}}. \quad (\text{B.26})$$

A partir de l'équation[[Gra07](#)]

$$P_{\nu-1}^{\mu}(x) - xP_{\nu}^{\mu}(x) = (\nu - \mu + 1)\sqrt{1 - x^2}P_{\nu}^{\mu-1}(x), \quad (\text{B.27})$$

on tire

$$P_{\nu}^1(x) = xP_{\nu+1}^{\mu}(x) + (\nu + 1)\sqrt{1 - x^2}P_{\nu+1}^0(x). \quad (\text{B.28})$$

En utilisant l'équation[[Gra07](#)]

$$\begin{aligned} (1 - x^2)\frac{dP_{\nu}^{\mu}(x)}{dx} &= -\sqrt{1 - x^2}P_{\nu}^{\mu+1}(x) - \mu xP_{\nu}^{\mu}(x) \\ &= (\nu - \mu + 1)(\nu + \mu)\sqrt{1 - x^2}P_{\nu}^{\mu-1}(x) + \mu xP_{\nu}^{\mu}(x), \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

on obtient

$$2xP_{\nu}^1(x) = -\sqrt{1 - x^2} [P_{\nu}^2(x) + \nu(\nu + 1)P_{\nu}^0(x)], \quad (\text{B.30})$$

ou bien

$$xP_{\nu}^1(x) = -\frac{1}{2}\sqrt{1 - x^2} [P_{\nu}^2(x) + \nu(\nu + 1)P_{\nu}^0(x)] \quad (\text{B.31})$$

Par conséquent,

$$xP_{\nu+1}^1(x) = -\frac{1}{2}\sqrt{1 - x^2} [P_{\nu+1}^2(x) + (\nu + 1)(\nu + 2)P_{\nu+1}^0(x)]. \quad (\text{B.32})$$

Insérant (B.32) dans (B.28), on obtient

$$\begin{aligned} P_{\nu}^1(x) &= -\frac{1}{2}\sqrt{1 - x^2} [P_{\nu+1}^2(x) + (\nu + 1)(\nu + 2)P_{\nu+1}^0(x)] \\ &\quad + (\nu + 1)\sqrt{1 - x^2}P_{\nu+1}^0(x) \\ &= -\frac{1}{2}\sqrt{1 - x^2} [\nu(\nu + 1)P_{\nu+1}^0(x) + P_{\nu+1}^2(x)]. \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

En combinant cette relation avec l'équation (B.25), on trouve

$$\begin{aligned}
 d_{lk}^L = & \frac{1}{4\alpha c_{lk}} \left\{ lk(l+1)(k+1) \int_{-1}^1 \operatorname{arctanh}(s) P_{l+1}^0(s) P_{k+1}^0(s) ds \right. \\
 & + l(l+1) \int_{-1}^1 \operatorname{arctanh}(s) P_{l+1}^0(s) P_{k+1}^2(s) ds \\
 & + k(k+1) \int_{-1}^1 \operatorname{arctanh}(s) P_{k+1}^0(s) P_{l+1}^2(s) ds \\
 & \left. + \int_{-1}^1 \operatorname{arctanh}(s) P_{l+1}^2(s) P_{k+1}^2(s) ds \right\} \quad (\text{B.34})
 \end{aligned}$$

Un produit de deux polynômes de Legendre associés peut être exprimé comme une somme de polynômes de Legendre associés de la manière suivante [Mav99] :

$$\begin{aligned}
 P_{l_1}^{m_1}(x) P_{l_2}^{m_2}(x) = & (-1)^{m_1} \sqrt{\frac{(l_1 + m_1)!(l_2 + m_2)!}{(l_1 - m_1)!(l_2 - m_2)!}} \\
 & \times \sum_k G \sqrt{\frac{(k - m_2 + m_1)!}{(k + m_2 - m_1)!}} P_k^{-m_1+m_2}(x) \quad (\text{B.35})
 \end{aligned}$$

où

$$G = (-1)^{-m_1+m_2} (2k+1) \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & k \\ -m_1 & m_2 & m_1 - m_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.36})$$

$|l_1 - l_2| \leq k \leq l_1 + l_2$, $k \geq |m_1 - m_2|$, $k + l_1 + l_2$ est pair et $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & k \\ -m_1 & m_2 & m_1 - m_2 \end{pmatrix}$ désignent les symboles 3- j de Wigner. Le symbole $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ impose la dernière des trois conditions sur k ci-dessus puisque ce symbole s'annule si $k + l_1 + l_2$ est impair.

Compte tenu des équations (B.35) et (B.36), on a :

$$\begin{aligned}
 P_{l+1}^0(s)P_{k+1}^0(s) &= \sum_{\lambda=|l-k|}^{l+k+2} (2\lambda+1) \begin{pmatrix} l+1 & k+1 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 &\quad \begin{pmatrix} l+1 & k+1 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} P_{\lambda}^0(s), \quad (\text{B.37})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_{l+1}^0(s)P_{k+1}^2(s) &= \sqrt{k(k+1)(k+2)(k+3)} \sum_{\lambda=\max(|l-k|, 2)}^{l+k+2} (2\lambda+1) \\
 &\quad \begin{pmatrix} l+1 & k+1 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l+1 & k+1 & \lambda \\ 0 & 2 & -2 \end{pmatrix} \\
 &\quad \times \frac{1}{\sqrt{(\lambda-1)\lambda(\lambda+1)(\lambda+2)}} P_{\lambda}^2(s), \quad (\text{B.38})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_{k+1}^0(s)P_{l+1}^2(s) &= \sqrt{l(l+1)(l+2)(l+3)} \sum_{\lambda=\max(|l-k|, 2)}^{l+k+2} (2\lambda+1) \\
 &\quad \begin{pmatrix} k+1 & l+1 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k+1 & l+1 & \lambda \\ 0 & 2 & -2 \end{pmatrix} \\
 &\quad \times \frac{1}{\sqrt{(\lambda-1)\lambda(\lambda+1)(\lambda+2)}} P_{\lambda}^2(s) \quad (\text{B.39})
 \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
 P_{l+1}^2(s)P_{k+1}^2(s) &= \sqrt{l(l+1)(l+2)(l+3)k(k+1)(k+2)(k+3)} \sum_{\lambda=|l-k|}^{l+k+2} (2\lambda+1) \\
 &\quad \begin{pmatrix} l+1 & k+1 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l+1 & k+1 & \lambda \\ -2 & 2 & 0 \end{pmatrix} P_{\lambda}^0(s) \quad (\text{B.40})
 \end{aligned}$$

Dès lors,

$$\begin{aligned}
 d_{lk}^L = & \frac{1}{4\alpha} \left\{ \sum_{\lambda=|l-k|}^{l+k+2} (2\lambda+1) \begin{pmatrix} l+1 & k+1 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left[\right. \\
 & \sqrt{l k (l+1)(k+1)} \begin{pmatrix} l+1 & k+1 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 & + \sqrt{(l+2)(l+3)(k+2)(k+3)} \begin{pmatrix} l+1 & k+1 & \lambda \\ -2 & 2 & 0 \end{pmatrix} \left. \right] I_\lambda \\
 & + \sum_{\lambda=\max(|l-k|, 2)}^{l+k+2} \frac{2\lambda+1}{\sqrt{(\lambda-1)\lambda(\lambda+1)(\lambda+2)}} \left[\right. \\
 & \sqrt{l(l+1)(k+2)(k+3)} \\
 & \times \begin{pmatrix} l+1 & k+1 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l+1 & k+1 & \lambda \\ 0 & 2 & -2 \end{pmatrix} \\
 & + \sqrt{k(k+1)(l+2)(l+3)} \begin{pmatrix} k+1 & l+1 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 & \times \begin{pmatrix} k+1 & l+1 & \lambda \\ 0 & 2 & -2 \end{pmatrix} \left. \right] J_\lambda \left. \right\} \quad (B.41)
 \end{aligned}$$

avec

$$I_\lambda \equiv \int_{-1}^1 \operatorname{arctanh}(s) P_\lambda^0(s) ds \quad (B.42)$$

et

$$J_\lambda \equiv \int_{-1}^1 \operatorname{arctanh}(s) P_\lambda^2(s) ds \quad (B.43)$$

Pour déterminer complètement d_{lk}^L , nous devons calculer les intégrales I_λ et J_λ .

Calcul de I_λ

On sait que les polynômes de Legendre $P_\lambda^0(s) \equiv P_\lambda(s)$ sont solutions de l'équation différentielle

$$\frac{d}{ds} \left[(1-s^2) \frac{d}{ds} P_\lambda(s) \right] + \lambda(\lambda+1) P_\lambda(s) = 0. \quad (B.44)$$

On en déduit

$$P_\lambda(s) = -\frac{1}{\lambda(\lambda+1)} \frac{d}{ds} \left[(1-s^2) \frac{d}{ds} P_\lambda(s) \right]. \quad (\text{B.45})$$

Par suite,

$$I_\lambda = -\frac{1}{\lambda(\lambda+1)} \int_{-1}^1 \operatorname{arctanh}(s) \frac{d}{ds} \left[(1-s^2) \frac{d}{ds} P_\lambda(s) \right] ds. \quad (\text{B.46})$$

On peut simplifier cette intégrale en procédant par parties. On pose $u = \operatorname{arctanh}(s)$ et $dv = \frac{d}{ds} \left[(1-s^2) \frac{d}{ds} P_\lambda(s) \right] ds$. On trouve

$$I_\lambda = \frac{1}{\lambda(\lambda+1)} \int_{-1}^1 dP_\lambda(s) = \begin{cases} 0 & \text{si } \lambda \text{ est pair} \\ \frac{2}{\lambda(\lambda+1)} & \text{si } \lambda \text{ est impair} \end{cases} \quad (\text{B.47})$$

Calcul de $J_\lambda \equiv \int_{-1}^1 \operatorname{arctanh}(s) P_\lambda^2(s) ds$

A partir de l'équation[[Gra07](#)]

$$P_{\nu-1}^\mu(x) - P_{\nu+1}^\mu(x) = (2\nu+1)\sqrt{1-x^2}P_\nu^{\mu-1}(x), \quad (\text{B.48})$$

on trouve

$$P_\lambda^2(s) = P_{\lambda-2}^2(s) - (2\lambda-1)\sqrt{1-s^2}P_{\lambda-1}^1(s). \quad (\text{B.49})$$

Par ailleurs[[Gra07](#)]

$$(\nu+\mu+1)xP_\nu^\mu(x) + \sqrt{1-x^2}P_\nu^{\mu+1}(x) = (\nu-\mu+1)P_{\nu+1}^\mu(x). \quad (\text{B.50})$$

Il découle de cette dernière équation que

$$\sqrt{1-s^2}P_{\lambda-1}^1(s) = \lambda P_\lambda^0(s) - \lambda s P_{\lambda-1}^0(s) \quad (\text{B.51})$$

$$= \lambda P_\lambda^0(s) - \lambda \left[\frac{\lambda}{2\lambda-1} P_\lambda^0(s) + \frac{\lambda-1}{2\lambda-1} P_{\lambda-2}^0(s) \right]. \quad (\text{B.52})$$

Le passage de (B.51) à (B.52) se fait en utilisant la relation (B.19) pour transformer $sP_{\lambda-1}^0(s)$:

$$sP_{\lambda-1}^0(s) = \frac{\lambda}{2\lambda-1}P_{\lambda}^0(s) + \frac{\lambda-1}{2\lambda-1}P_{\lambda-2}^0(s). \quad (\text{B.53})$$

Substituant (B52) dans (B.49), on obtient

$$P_{\lambda}^2(s) = P_{\lambda-2}^2(s) + \lambda(1-\lambda)P_{\lambda}^0(s) + \lambda(\lambda-1)P_{\lambda-2}^0(s). \quad (\text{B.54})$$

Dès lors,

$$\begin{aligned} J_{\lambda} &\equiv \int_{-1}^1 \operatorname{arctanh}(s) P_{\lambda}^2(s) ds \\ &= J_{\lambda-2} + \lambda(1-\lambda) \int_{-1}^1 \operatorname{arctanh}(s) P_{\lambda}^0(s) ds \\ &\quad + \lambda(\lambda-1) \int_{-1}^1 \operatorname{arctanh}(s) P_{\lambda-2}^0(s) ds \end{aligned} \quad (\text{B.55})$$

ou bien

$$J_{\lambda} = J_{\lambda-2} + \lambda(1-\lambda)I_{\lambda} + \lambda(\lambda-1)I_{\lambda-2}, \quad (\text{B.56})$$

I_{λ} étant donné par l'équation (B.47). L'équation (B.56) est une relation de récurrence pour J_{λ} . La plus petite valeur de λ pour laquelle J_{λ} n'est pas nulle est 3 car $\lambda \geq 2$ et $J_{\lambda} = 0$ si λ est pair. Il nous faut donc calculer $J_3 \equiv \int_{-1}^1 \operatorname{arctanh}(s) P_3^2(s) ds$, puis utiliser la relation de récurrence (B.56) pour déterminer $J_5, J_7, J_9, J_{11}, \dots$. On trouve $J_3 = 5$. Par conséquent, nous avons

$$J_{\lambda} = \begin{cases} 0 & \text{si } \lambda \text{ est pair} \\ 5 & \text{si } \lambda = 3 \\ J_{\lambda-2} + 2\frac{1-\lambda}{1+\lambda} + 2\frac{\lambda}{\lambda-2}; & \lambda = 5, 7, 9, 11, \dots \end{cases} \quad (\text{B.57})$$

Annexe C

Les approximants de Padé

Soit une fonction $f(z)$ donnée par son développement en série de puissances valable au voisinage de l'origine :

$$f(z) = c_0 + c_1 z + c_2 z^2 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n. \quad (\text{C.1})$$

On veut trouver un ensemble de fractions rationnelles dépendantes de z qui approximent valablement $f(z)$ au voisinage de l'origine. Les approximants de Padé offrent une solution à ce problème. Cette solution ne prétend pas être optimale, mais elle présente l'avantage de se laisser calculer assez facilement tout en accélérant la convergence de la série initiale, loin de l'origine, dans un certain nombre de cas.

C.1 Définition des approximants de Padé

Suivant la notation de Baker et Graves–Morris [Bak81], l'approximant de Padé de $f(z)$, qui est le rapport de deux polynômes $p_l(z)$ et $q_m(z)$ de degrés l et m respectivement, est noté $[l/m]_f(z)$:

$$[l/m]_f(z) = \frac{p_l(z)}{q_m(z)} = \frac{a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + \cdots + a_l z^l}{b_0 + b_1 z + b_2 z^2 + \cdots + b_m z^m} \quad (\text{C.2})$$

Les coefficients a_n et b_n de cette fraction rationnelle sont tels que $a_l \neq 0$ et $b_m \neq 0$ et tels que le développement en série de MacLaurin de $[l/m]_f(z)$ coïncide avec la série $f(z)$ aussi loin que possible, c'est-à-dire généralement jusqu'au terme en z^{l+m} inclus. En d'autres termes, la

différence entre la série et cette fraction rationnelle commencera avec un terme de degré $l + m + 1$:

$$f(z) - [l/m]_f(z) = O(z^{l+m+1}). \quad (\text{C.3})$$

Pour obtenir les coefficients a_n et b_n de l'approximant $[l/m]_f(z)$, on procède comme suit [Bre78, Ku89] : On écrit la relation (C.3) sous la forme

$$(c_0 + c_1 z + \cdots + c_{l+m} z^{l+m})(b_0 + b_1 z + \cdots + b_m z^m) - (a_0 + a_1 z + \cdots + a_l z^l) = O(z^{l+m+1}). \quad (\text{C.4})$$

Cette équation devant être valable pour tout z , on obtient le système linéaire suivant, en annulant les coefficients de $z^{l+1}, z^{l+2}, \dots, z^{l+m}$:

$$\begin{cases} c_{l+1} b_0 + c_l b_1 + \cdots + c_{l-m+1} b_m = 0 \\ c_{l+2} b_0 + c_{l+1} b_1 + \cdots + c_{l-m+2} b_m = 0 \\ \vdots \\ c_{l+m} b_0 + c_{l+m-1} b_1 + \cdots + c_l b_m = 0 \end{cases} \quad (\text{C.5})$$

Etant donné qu'une fraction rationnelle n'est définie qu'à un facteur multiplicatif près pour le numérateur et le dénominateur, b_0 peut être posé égal à 1 sans que cela altère la généralité du développement, puisque $f(z)$ doit être définie à l'origine ($b_0 \neq 0$). Le système (C.5) devient :

$$\begin{cases} c_{l+1} + c_l b_1 + \cdots + c_{l-m+1} b_m = 0 \\ c_{l+2} + c_{l+1} b_1 + \cdots + c_{l-m+2} b_m = 0 \\ \vdots \\ c_{l+m} + c_{l+m-1} b_1 + \cdots + c_l b_m = 0 \end{cases} \quad (\text{C.6})$$

Dans les relations (C.5) et (C.6), on fera la convention que $c_n = 0$ si l'indice n est négatif.

Les coefficients a_n sont alors calculés grâce au système des relations

$$\begin{cases} a_0 = c_0 \\ a_1 = c_1 + b_1 c_0 \\ a_2 = c_2 + b_1 c_1 + b_2 c_0 \\ \vdots \\ a_l = c_l + \sum_{n=1}^{\min(l, m)} b_n c_{l-n} \end{cases} \quad (\text{C.7})$$

Les polynômes q_m et p_l sont exprimés en termes des coefficients c_n de la série $f(z)$ en utilisant les formules suivantes [Bak81, Ku89] :

$$q_m(z) = \begin{vmatrix} c_{l-m+1} & c_{l-m+2} & \cdots & c_{l+1} \\ c_{l-m+2} & c_{l-m+3} & \cdots & c_{l+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{l-1} & c_l & \cdots & c_{l+m-1} \\ c_l & c_{l+1} & \cdots & c_{l+m} \\ z^m & z^{m-1} & \cdots & z^0 \end{vmatrix} \quad (\text{C.8})$$

et

$$p_l(z) = \begin{vmatrix} c_{l-m+1} & c_{l-m+2} & \cdots & c_{l+1} \\ c_{l-m+2} & c_{l-m+3} & \cdots & c_{l+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{l-1} & c_l & \cdots & c_{l+m-1} \\ c_l & c_{l+1} & \cdots & c_{l+m} \\ \sum_{n=0}^{l-m} c_n z^{m+n} & \sum_{n=0}^{l-m+1} c_n z^{m+n-1} & \cdots & \sum_{n=0}^l c_n z^n \end{vmatrix} \quad (\text{C.9})$$

Ces deux formules sont alors utilisées pour calculer les approximants de Padé $[l/m]_f(z)$ qui, compte tenu de la définition (C.2), vont se présenter sous forme de rapports de deux déterminants :

$$[l/m]_f(z) = \frac{\begin{vmatrix} c_{l-m+1} & c_{l-m+2} & \cdots & c_{l+1} \\ c_{l-m+2} & c_{l-m+3} & \cdots & c_{l+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{l-1} & c_l & \cdots & c_{l+m-1} \\ c_l & c_{l+1} & \cdots & c_{l+m} \\ \sum_{n=0}^{l-m} c_n z^{m+n} & \sum_{n=0}^{l-m+1} c_n z^{m+n-1} & \cdots & \sum_{n=0}^l c_n z^n \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} c_{l-m+1} & c_{l-m+2} & \cdots & c_{l+1} \\ c_{l-m+2} & c_{l-m+3} & \cdots & c_{l+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{l-1} & c_l & \cdots & c_{l+m-1} \\ c_l & c_{l+1} & \cdots & c_{l+m} \\ z^m & z^{m-1} & \cdots & z^0 \end{vmatrix}} \quad (\text{C.10})$$

Toutefois, il est beaucoup plus convenable (et plus économique) de calculer ces approximants à l'aide d'un algorithme d'accélération de la convergence appelé *algorithme epsilon de Wynn* [Bre78, Mac64] (Annexe D).

Les approximants de Padé sont placés dans un tableau à double entrée appelé la *table de Padé* :

TAB. C.1 – Table de Padé pour $l, m = 0, 1, \dots, 4$.

$l \backslash m$	0	1	2	3	4
0	[0/0]	[1/0]	[2/0]	[3/0]	[4/0]
1	[0/1]	[1/1]	[2/1]	[3/1]	[4/1]
2	[0/2]	[1/2]	[2/2]	[3/2]	[4/2]
3	[0/3]	[1/3]	[2/3]	[3/3]	[4/3]
4	[0/4]	[1/4]	[2/4]	[3/4]	[4/4]

Dans une table de Padé, le premier indice l indique la colonne et le second m la ligne du tableau. La première ligne de la table de Padé est constituée par les sommes partielles de la série (C.1).

C.2 Propriétés des approximants de Padé

Nous allons donner un certain nombre de théorèmes concernant les propriétés des approximants de Padé sans les démontrer. Les démonstrations de ces théorèmes peuvent être trouvées dans [Bak65] et dans [Bak81].

Théorème C.1 (Unicité) *S'il existe, l'approximant de Padé $[l/m]_f(z)$ est unique.*

Théorème C.2 *Si $f(0) \neq 0$, alors :*

$$[l/m]_{\frac{1}{f}}(z) = \frac{1}{[m/l]_f(z)}. \quad (\text{C.11})$$

On voit que ce résultat relie les deux moitiés de la table de Padé. La série $g(z) \equiv \frac{1}{f(z)}$ s'appelle la série réciproque de $f(z)$. Son étude est très importante ; l'approximant $[l/m]_g(z)$ est en effet l'inverse de $[m/l]_f(z)$ d'après le théorème précédent.

Théorème C.3 Soit la fonction $f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i$. Si l'on fait le changement de variable

$$w = \frac{a z}{1 + b z} \quad (\text{C.12})$$

et si l'on définit une nouvelle fonction g par l'équation

$$g(w) = f(z), \quad (\text{C.13})$$

alors :

$$[l/l]_g(w) = [l/l]_f(z). \quad (\text{C.14})$$

Cette propriété est très importante parce qu'elle donne naissance à la convergence des approximants de Padé dans une région plus vaste que le cercle de convergence de la série de Taylor de $f(z)$. Elle prouve donc que les approximants de Padé sont efficaces pour faire la continuation analytique de la fonction $f(z)$ en-dehors du cercle de convergence de la série de Taylor correspondant à cette fonction.

Théorème C.4 Soit la fonction $f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i$ et une fonction g définie par

$$g(z) = \frac{a + b f(z)}{c + d f(z)}. \quad (\text{C.15})$$

Si $c + d f(0) \neq 0$, alors

$$[l/l]_g(z) = \frac{a + b [l/l]_f(z)}{c + d [l/l]_f(z)} \quad (\text{C.16})$$

pourvu que $[l/l]_f(z)$ existe.

Théorème C.5 (Unitarité) Soit $f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i$ une fonction unitaire :

$$f(z) [f(z)]^* = 1. \quad (\text{C.17})$$

Si $[l/l] = [l/l]_f(z)$ est un approximant de Padé diagonal de $f(z)$, alors

$$[l/l] [l/l]^* = 1. \quad (\text{C.18})$$

Nous disons que les approximants de Padé diagonaux préservent l'unitarité.

Signalons, pour terminer cet annexe, qu'il est possible d'appliquer les approximants de Padé à des séries numériques. En effet, toute série numérique

$$s = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \quad (\text{C.19})$$

peut être considérée comme la valeur de la fonction

$$s(z) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i \quad (\text{C.20})$$

au point $z = 1$.

Annexe D

Algorithme epsilon de Wynn

D.1 Introduction : Convergence des suites

Considérons la suite

$$\{s_n\} \equiv s_0, s_1, s_2, \dots \quad (\text{D.1})$$

qui converge vers une certaine limite s ou qui, si elle diverge, peut donner s grâce à une méthode de sommation appropriée. Dans ce dernier cas, s est appelée “*anti-limite*”. Pour quantifier la vitesse de convergence de cette suite, il suffit d’étudier son comportement asymptotique. On peut écrire :

$$s_n = s + as(n) \quad (\text{D.2})$$

en sorte que l’erreur relative que l’on commet sur s en se limitant à s_n vaut :

$$\left| \frac{s - s_n}{s} \right| = \left| \frac{as(n)}{s} \right|. \quad (\text{D.3})$$

La connaissance du comportement asymptotique de la suite permet donc d’en estimer la convergence. S’il s’avère que la vitesse de convergence de la suite $\{s_n\}$ est faible, il peut être utile de transformer cette suite en une autre suite, $\{\sigma_n\}$ par exemple, qui tendrait plus rapidement vers la même limite ou *anti-limite* s .

Plusieurs algorithmes peuvent être utilisés pour l’accélération de la convergence d’une suite. Nous ne considérons que l’*algorithme epsilon* qui, comme nous allons le voir, permet de calculer les approximants de Padé. Cet algorithme est fortement lié à la *transformation de Shanks*.

D.2 La transformation de Shanks

Dans son article sur les transformations non-linéaires des suites, Shanks [Sha55] a considéré la suite suivante :

$$s_n = s + \sum_{j=0}^{k-1} c_j \Delta s_{n+j} ; n \in \mathbb{N} ; \quad (\text{D.4})$$

où Δs est défini par

$$\Delta s_n = s_{n+1} - s_n. \quad (\text{D.5})$$

Si les éléments s_n de la suite (D.4) sont les sommes partielles d'une série infinie,

$$s_n = \sum_{\nu=0}^n a_\nu , \quad (\text{D.6})$$

cette suite peut aussi être écrite comme suit :

$$s_n = s + \sum_{j=0}^{k-1} c_j a_{n+j+1} ; n \in \mathbb{N}. \quad (\text{D.7})$$

Cela signifie que la limite ou anti-limite s de la série infinie est approximée par la somme partielle s_n plus une somme pondérée des k termes $a_{n+1}, a_{n+2}, \dots, a_{n+k}$ qui suivent immédiatement. Nous voyons que la suite (D.4) contient $k + 1$ inconnues – la limite (ou anti-limite) s et les k coefficients $c_0, c_1, \dots, c_{k-1}$ – qui toutes apparaissent linéairement. Le but de Shanks, en construisant sa transformation [Sha55], a été que celle-ci fournisse s pour la suite (D.4) et, plus généralement, pour toute suite de la forme

$$s_n = s + \sum_{j=0}^k c_j \lambda_j^n , n \in \mathbb{N}.$$

La transformation de Shanks est donnée sous forme d'un rapport de

deux déterminants [Bre78, Sha55, Wyn56] :

$$e_k(s_n) = \frac{\begin{vmatrix} s_n & s_{n+1} & \cdots & s_{n+k} \\ \Delta s_n & \Delta s_{n+1} & \cdots & \Delta s_{n+k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta s_{n+k-1} & \Delta s_{n+k} & \cdots & \Delta s_{n+2k-1} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ \Delta s_n & \Delta s_{n+1} & \cdots & \Delta s_{n+k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta s_{n+k-1} & \Delta s_{n+k} & \cdots & \Delta s_{n+2k-1} \end{vmatrix}} \quad (\text{D.8})$$

Remarquons que pour calculer la transformée $e_k(s_n)$, on a besoin d'éléments $s_n, s_{n+1}, \dots, s_{n+2k}$, ce qui implique que $e_k(s_n)$ est une transformation d'ordre $2k$.

D.3 Transformation de Shanks et approximants de Padé

Soit $f_n(z)$ une somme partielle de la série de puissances (C.1) :

$$f_n(z) = \sum_{\nu=0}^n c_\nu z^\nu. \quad (\text{D.9})$$

Si l'on applique la transformation de Shanks à la suite $\{f_n(z)\}$, en tenant compte de ce que

$$\Delta f_n(z) = f_{n+1}(z) - f_n(z) = c_{n+1} z^{n+1}, \quad (\text{D.10})$$

on trouve [Sha55] que la relation (D.8) a la forme déterminante de l'approximant de Padé $[n + k/k]_f(z)$. On a donc l'identité importante :

$$e_k(f_n(z)) = [n + k/k]_f(z); \quad k, n \in \mathbb{N}. \quad (\text{D.11})$$

D.4 L'algorithme epsilon

Dû à Wynn, l'algorithme epsilon procède au calcul récuratif des quantités $e_k(s_n)$ de la transformation de Shanks définies par la relation (D.8) et, par conséquent, les approximants de Padé. Dans cet algorithme, on calcule des quantités avec deux indices $\epsilon_k^{(n)}$. Les règles de

calcul de l'algorithme epsilon sont les suivantes [Bak81, Bre78] :

$$\begin{cases} \epsilon_{-1}^{(n)} = 0, \quad \epsilon_0^{(n)} = s_n; \quad n = 0, 1, 2, \dots \\ \epsilon_{k+1}^{(n)} = \epsilon_{k-1}^{(n+1)} + \frac{1}{\epsilon_k^{(n+1)} - \epsilon_k^{(n)}}; \quad k, n = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \quad (\text{D.12})$$

On place ces quantités dans un tableau à double entrée appelé le *tableau* ϵ :

$$\begin{array}{ccccccc} \epsilon_{-1}^{(0)} = 0 & & & & & & \\ & \epsilon_0^{(0)} = s_0 & & & & & \\ \epsilon_{-1}^{(1)} = 0 & & \epsilon_1^{(0)} & & & & \\ & \epsilon_0^{(1)} = s_1 & & \epsilon_2^{(0)} & & & \\ \epsilon_{-1}^{(2)} = 0 & & \epsilon_1^{(1)} & & \epsilon_3^{(0)} & & \\ & \epsilon_0^{(2)} = s_2 & & \epsilon_2^{(1)} & & \epsilon_4^{(0)} & \ddots \\ \epsilon_{-1}^{(3)} = 0 & & \epsilon_1^{(2)} & & \epsilon_3^{(1)} & & \\ & \epsilon_0^{(3)} = s_3 & & \epsilon_2^{(2)} & & \epsilon_4^{(1)} & \ddots \\ \epsilon_{-1}^{(4)} = 0 & & \epsilon_1^{(3)} & & \epsilon_3^{(2)} & & \\ \vdots & \epsilon_0^{(4)} = s_4 & \vdots & \epsilon_2^{(3)} & \vdots & \epsilon_4^{(2)} & \\ & \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots \end{array}$$

TAB. D.1 – Tableau ϵ

Dans ce tableau, l'indice inférieur reste constant dans une colonne tandis que l'indice supérieur reste constant dans une diagonale descendante.

La relation (D.12) relie des quantités situées aux quatre sommets d'un losange :

$$\begin{array}{ccccc}
 & & \epsilon_k^{(n)} & & \\
 & \nearrow & & \searrow & \\
 \epsilon_{k-1}^{(n+1)} & & & & \epsilon_{k+1}^{(n)} \\
 & \searrow & & \nearrow & \\
 & & \epsilon_k^{(n+1)} & &
 \end{array} \quad (D.13)$$

Si l'on connaît $\epsilon_{k-1}^{(n+1)}$, $\epsilon_k^{(n)}$ et $\epsilon_k^{(n+1)}$, la relation (D.12) permet de calculer $\epsilon_{k+1}^{(n)}$; c'est ce que signifient les flèches du tableau (D.13). La relation (D.12) permet donc de progresser de la gauche vers la droite et de haut en bas dans le tableau ϵ à partir des conditions initiales $\epsilon_{-1}^{(n)} = 0$ et $\epsilon_0^{(n)} = s_n$ pour $n = 0, 1, 2, \dots$: si l'on connaît s_0 et s_1 , on peut calculer $\epsilon_1^{(0)}$; si l'on connaît s_1 et s_2 , on peut calculer $\epsilon_1^{(1)}$; à partir de $\epsilon_1^{(0)}$ et de $\epsilon_1^{(1)}$, on obtiendra ensuite $\epsilon_2^{(0)}$ et ainsi de suite.

Les détails sur l'algorithme epsilon de Wynn peuvent être trouvés dans [Wen89, Wyn66].

D.5 L'algorithme epsilon et la transformation de Shanks

La propriété fondamentale de l'algorithme epsilon est celle qui le relie directement à la transformation de Shanks et, par suite, aux approximations de Padé. L'algorithme epsilon est dû à Wynn. C'est lui qui l'a relié à la transformation de Shanks. Cette liaison repose sur le théorème suivant [Wyn56] :

Théorème D.1

$$\epsilon_{2k}^{(n)} = e_k(s_n) \text{ et } \epsilon_{2k+1}^{(n)} = \frac{1}{e_k(\Delta s_n)} ; n, k = 0, 1, 2, \dots \quad (D.14)$$

Ainsi, on voit que les colonnes paires de l'algorithme epsilon sont identiques à la transformation de Shanks. On voit aussi que les quantités d'indice inférieur impair sont les inverses des nombres obtenus en appliquant la transformation de Shanks à la suite $\{\Delta s_n = s_{n+1} - s_n\}$.

Le théorème suivant [Bre78] établit une liaison entre l'algorithme epsilon et les approximations de Padé :

Théorème D.2 Soit $f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i$ une série de puissances. Si pour z fixé on applique l'algorithme epsilon à la suite des sommes partielles de cette série,

$$\epsilon_0^{(n)} = s_n = \sum_{i=0}^n c_i z^i, \quad (\text{D.15})$$

alors :

$$\epsilon_{2k}^{(n)} = [n + k/k]_f(z); \quad n, k = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{D.16})$$

Une description d'un programme FORTRAN 77 qui calcule la transformation de Shanks d'une suite donnée au moyen de l'algorithme epsilon peut être trouvée dans [Wen89].

Bibliographie

- [Abr70] Abramowitz M. and Stegun I. A., *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications, New York, 1970).
- [Agu71] Aguilar J. and Combes J.M., *Commun. Math. Phys.*, **22**, (1971), 269.
- [Ant01] Antoine J.-P. et al., *J. Math. Phys.*, **42**, (2001), 2349.
- [Bal71] Balslev E. and Combes J. M., *Commun. Math. Phys.* **22**, (1971), 280.
- [Bak65] Baker G. A., *Adv. in Theor. Phys.* **1** (Academic Press, New York–London, 1965).
- [Bak81] Baker G. A. and Graves–Morris P., *Padé approximants. Part I : Basic theory. Part II : Extensions and applications* (Addison–Wesley, Massachusetts, 1981).
- [Bay79] Bayfield J. E., *Phys. Rep.*, **51C**, (1979), 317.
- [Ben78] Bender C. M. and Orszag S. A., *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers* (McGraw–Hill, New York, 1978).
- [Bet57] Bethe H.A and Salpeter E.E., *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*, (Springer-Verlag, Berlin 1957).
- [Bre78] Brezinski C., *Algorithmes d'accélération de la convergence. Etude numérique* (Editions Technip, Paris, 1978).
- [Brou04] Brouri M. S and Urbain X., *Inst. Phys. Ser.*, **183**, (2004), 123.
- [Bu95] Buchleitner A., Delande D. and Gay J. C., *J. Opt. Soc. Am. B*, **12**, (1995), 505.

- [Chu89] Chu S.I. , *Adv. Chem. Phys.* , **73** , (1989) , 739.
- [Coh01] Cohen-Tannoudji Cl. , Dupont-Roc J. and Grynberg G. , *Processus d'interaction entre photons et atomes* , (CNRS Éditions, Paris, 2001).
- [Coh73] Cohen-Tannoudji Cl. , Diu B. and Laloë F. , *Mécanique Quantique* , (Hermann, Paris, 1973).
- [Col76] Coleman J. P. , *IMA J. Appl. Math.* , **17** , (1976) , 85.
- [Corm94] Cormier E. , *Thèse de doctorat* , (Université Bordeaux I, 1994).
- [Cou53] Courant R. and Hilbert D. , *Methods of Mathematical Physics* , (Interscience Publishers, New-York, 1953).
- [Cur52] Curtis C. F. and Hirschfelder J. O. , *Proc. Nat. Acad. Sci.* , **38** , (1952) , 235.
- [Dio76] Dion D. R. and Hirschfelder J. O. , *Adv. Chem. Phys.* , **35** , (1976) , 265.
- [Eri80] Ericsson T. and Ruhe A. , *Math. Comput.* , **35** , (1980) , 1251.
- [Fai87] Faisal F. H. M. , *Theory of Multiphoton Processes* , (Plenum, 1987), Chap. 11.
- [Fan61] Fano U. , *Phys. Rev.* , **124** , (1961) , 1866.
- [Fatu80] Fatunla S. O. , *Math. Comp.* , **34** , (1980) , 373.
- [Fin72] Finlayson B. A. , *The Method of Weighted Residuals and Variational Principles* (Academic Press, New York, 1972).
- [Flu71] Flugge S. , *Practical Quantum Mechanics I* , (Springer-Verlag, Berlin, 1971).
- [Frie48] Friedrichs O. K. , *Comm. Pure Appl. Math.* , **1** , (1980) , 361.
- [Frit73] Fritz O. , *Fourier Transforms of Distributions and Their Inverses* , (Academic Press, New York, 1973).
- [Fuj08] Fujiyoshi M. and Tasaki sh. , *Prog. Theor. Phys.* , **119** , (2008) , 883.
- [Gra07] Gradshteyn I. S. and Ryzhik I. M. , *Tables of Integrals, Series and Products* , (Academic Press, New York, 2007).
- [Gro99] Grosge T. , *Thèse de doctorat* , (UCL, 1999).
- [Guerin] Nyengeri H., Guerin S., Piraux B. , preprint.

- [Hai91] Hairer E. and Wanner G., *Solving Ordinary Differential Equations II : Stiff and Differential-Algebraic Problems*, (Springer-Verlag, 1991).
- [Hue96] Huens E., *Thèse de doctorat*, (UCL, 1996).
- [Hue97] Huens E. and Piraux B., *Phys. Rev. A*, **55**, (1997), 2132.
- [Jenn92] Jennings A. and McKeown JJ., *Matrix computation. Second edition*, (John Wiley & Sons, Chichester, 1992).
- [Joh83] Johnson B. R. and Reinhardt W. P., *Phys. Rev. A*, **28**, (1983), 1930.
- [Koch97] Kochrosky V.V. and al, *Computers Math. Applic.*, **34**, (1997), 727.
- [Ku89] Kukulin V. I., Krasnopol'sky V.M. and Horáček J., *Theory of Resonances*, (Kluwer Academic Publishers, Boston–London, 1989).
- [Lag99] Lagmago Kamta G., *Thèse de doctorat*, (UCL, 1999).
- [Lam80] Lamb G.L., *Elements of Soliton Theory*, (Jr. Editeur, New York, 1980).
- [Lanc50] Lanczos C. J., *Res. Nat. Bur. Standards, Sect. B*, **45**, (1950), 225.
- [Mac64] Macdonald R., *J. Appl. Phys.*, **35**, (1964), 3034.
- [Madr08] Madroñero J. and Piraux B., (en préparation).
- [Mav99] Mavromatis H. A., *J. Phys. A*, **32**, (1999), 2601.
- [McC89] McCurdy C. W. and Stroud C. K., *Chem. Phys. Lett.*, **156**, (1989), 483.
- [McC91] McCurdy C. W., Stroud C. K. and Wisinski M. K., *Phys. Rev. A*, **43**, (1991), 5980.
- [Mer70] Merzbacher E., *Quantum Mechanics. Second Edition*, (John Wiley & Sons, New York 1970).
- [MI82] Mittleman M.H., *Introduction to the Theory of Laser-Atom Interactions*, (Plenum Press, New York 1982).
- [Moi98] Moiseyev N., *Phys. Rep.*, **302**, (1998), 211.
- [Mor53] Morse P. and Feshbach H., *Methods of Theoretical Physics*, (MacGraw–Hill, 1953).
- [Nou01] Nouredine Z., *Quantum Mechanics. Concepts and Applications*, (John Wiley & Sons Ltd, New–York, 2001).

- [Par79] Parlett B. N. and Scott D. S. , *Math. Comput.* , **33** , (1979) , 217.
- [Pir88] Piraux B., Bhatt R. and Burnett K. , *Phys. Rev. A* , **37** , (1988) , 98.
- [Pir94] Piraux B. and Shakeshaft R. , *Phys. Rev. A* , **49** , (1994) , 3903.
- [Pon91] Pont M., Proulx D. and Shakeshaft R. , *Phys. Rev. A* , **44** , (1991) , 4486.
- [Pot92] Potvliege R. M. and Shakeshaft R. , *Adv. At. Mol. Phys. Suppl.* , **1** , (1992) , 373.
- [Pot98] Potvliege R.M. , *Comput. Phys. Commun.* , **114** , (1998) , 42.
- [Rash86] Rashid M. A. , *J. Phys. A* , **19** , (1986) , 2505.
- [Rei82] Reinhardt W. P. , *Annu. Rev. Phys. Chem.* , **33** , (1982) , 223.
- [Sha55] Shanks D. , *J. Math. and Phys.* , **34** , (1955) , 1.
- [Sie39] Siegert A. J. F. , *Phys. Rev.* , **56** , (1939) , 750.
- [Stro05] Stroe M. and Boca M. , *Phys. Rev. A* , **71** , (2005) , 017401-1.
- [Wen85] Weniger E. J. , *J. Math. Phys.* , **26** , (1985) , 276.
- [Wen89] Weniger E. J. , *Computer Physics Reports* , **10** , '1989) , 189.
- [Wil66] Wilets L. and Gallaher D. F. , *Phys. Rev.* , **147** , (1966) , 13.
- [Win91] Winter T. , *Phys. Rev. A* , **43** , (1991) , 4727.
- [Wyn56] Wynn P. , *Math. Tables Aids Comput.* , **10** , (1956) , 91.
- [Wyn66] Wynn P. , *J. Numer. Anal.* , **3** , (1966) , 91.
- [Yas02] Yasuike T. and Someda K. , *Phys. Rev. A* , **66** , (2002) , 053410-1.