



HAL
open science

Étude théorique de l'influence des collisions élastiques sur un gaz dilué de particules chargées, confinées par un champ de radio-fréquence à symétrie quadrupolaire

J. André

► **To cite this version:**

J. André. Étude théorique de l'influence des collisions élastiques sur un gaz dilué de particules chargées, confinées par un champ de radio-fréquence à symétrie quadrupolaire. *Journal de Physique*, 1976, 37 (6), pp.719-730. 10.1051/jphys:01976003706071900 . jpa-00208467

HAL Id: jpa-00208467

<https://hal.science/jpa-00208467>

Submitted on 4 Feb 2008

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

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

Classification
Physics Abstracts
 0.680 — 1.650

ÉTUDE THÉORIQUE DE L'INFLUENCE DES COLLISIONS ÉLASTIQUES SUR UN GAZ DILUÉ DE PARTICULES CHARGÉES, CONFINÉES PAR UN CHAMP DE RADIO-FRÉQUENCE A SYMÉTRIE QUADRUPOLAIRE

J. ANDRÉ

Interactions ioniques, Université de Provence, 13397 Marseille Cedex 4, France

(Reçu le 25 juillet 1975, révisé le 28 janvier 1976, accepté le 4 février 1976)

Résumé. — On étudie l'influence des chocs élastiques sur une population de particules chargées électriquement, formant un milieu dilué et confinées par un champ radio-fréquence à symétrie quadrupolaire. L'étude est faite sur un modèle unidimensionnel et utilise un processus de Markov associé à l'évolution de la population. Après avoir établi les équations spécifiques qui permettent l'étude des grandeurs intéressantes, on étudie numériquement ces équations, et on en déduit des conclusions sur les propriétés énergétiques des particules chargées. La théorie prévoit également la possibilité d'améliorer le confinement en introduisant un gaz léger. Ce résultat est confirmé par l'observation.

Abstract. — We investigate the influence of the elastic collisions on a population of charged particles, which constitute a dilute medium, and which are confined by a quadrupolar radio-frequency field. The investigation is carried out with a unidimensional model, with the aid of a Markov process associated with the evolution of the population. After the establishment of the specific equations which allow the determination of the interesting parameters, we investigate these equations numerically, and we deduce conclusions for the energetical properties of charged particles. The theory also shows that it is possible to improve the trapping, if a light gas is introduced. This result is confirmed by previous observations.

1. **Introduction.** — La spectroscopie à grande résolution des atomes et des molécules neutres utilise des milieux dilués constitués par des jets ou des vapeurs sous de très faibles pressions. Les particules chargées présentent l'avantage de pouvoir être confinées en l'absence de tout choc avec des parois, pendant des durées de vie très longues, pouvant atteindre plusieurs minutes. En effet, W. Paul [1] a montré qu'une particule chargée évoluant dans un champ de radio-fréquence à symétrie quadrupolaire pouvait avoir un mouvement stable (donc être confinée) dans certaines conditions. Cette technique a été appliquée depuis en spectrométrie de masse [2] et dans des expériences de spectroscopie [3].

De même que les caractéristiques du jet atomique (vitesse moyenne, répartition des vitesses, densité...) doivent être connues pour la compréhension des phénomènes étudiés, la spectroscopie des ions confinés réclame la connaissance des grandeurs analogues pour les particules chargées; d'où l'intérêt d'une étude de la statistique des ions confinés, étude qui n'a été que très succinctement abordée [4, 5]. En effet, si en théorie les particules piégées peuvent conserver

un mouvement stable, plusieurs mécanismes interviennent, qui peuvent modifier leurs propriétés énergétiques, ou qui peuvent les faire sortir de la trappe. Un mécanisme important est constitué par les chocs avec les molécules de gaz, soit résiduel, soit introduit volontairement en très faible quantité pour modifier dans le sens voulu la répartition des particules ionisées. Il est donc nécessaire d'étudier l'influence des chocs en l'absence de charge d'espace (hypothèse réaliste, puisque des expériences peuvent être effectuées sous des pressions partielles d'ions de l'ordre de 10^{-14} torr, soit quelques centaines de particules [6]).

Du fait de la complexité du problème, due à de nombreuses causes, dont les principales sont: un hamiltonien non constant au cours du temps — un nombre de particules confinées non constant — les fortes variations possibles au cours du choc des valeurs de l'état mécanique des particules, nous n'avons pas utilisé les équations classiques pour ce problème non conservatif (équation de Boltzmann ou équation de Fokker-Planck), mais nous avons étudié un modèle mathématique (utilisant les processus de Markov) plus simple car spécifique, et

dont l'article rend compte. L'étude est ici faite sur un modèle unidimensionnel [7], mais en utilisant des méthodes mathématiques qui peuvent être généralisées à trois dimensions. L'utilisation de ce modèle permet alors d'obtenir un ensemble d'équations décrivant la statistique des ions confinés.

Afin d'éviter toute confusion entre les divers types de particules intervenant dans l'exposé, nous réservons le terme *ion* à toute particule confinée et le terme *molécule* à toute particule non confinée.

2. Etude du modèle. — 2.1 MOUVEMENT D'UNE PARTICULE CONFINÉE DANS UN CHAMP DE RADIO-FRÉQUENCE A SYMÉTRIE QUADRUPOLAIRE. — Nous considérons ici la symétrie du champ de confinement qui est la plus couramment utilisée, car les équations du mouvement d'une particule chargée dans une telle trappe sont relativement simples. Ce champ a pour axe de symétrie l'axe Ox_3 et il est limité par des parois engendrées par les hyperboles dont les équations dans un plan (Ox_3, Or) sont données par :

$$\frac{x_3^2}{z_0^2} - \frac{r^2}{r_0^2} = 1 \quad (1)$$

et

$$\frac{x_3^2}{z_0^2} - \frac{r^2}{r_0^2} = -1 \quad (2)$$

avec la condition :

$$r_0^2 = 2 z_0^2$$

imposée pour la configuration quadrupolaire. Les deux arcs d'hyperboles définis par l'éq. (1) engendrent le *chapeau* ; les deux arcs d'hyperbole définis par l'éq. (2) engendrent la *couronne* (Fig. 1). Si on établit entre les deux chapeaux et la couronne la différence de potentiel :

$$V(t) = V_{dc} - V_{ac} \cos \Omega t,$$

les équations du mouvement dans un système de coordonnées cartésiennes fixes (Ox_1, Ox_2, Ox_3) se séparent et ont la forme classique d'équations de

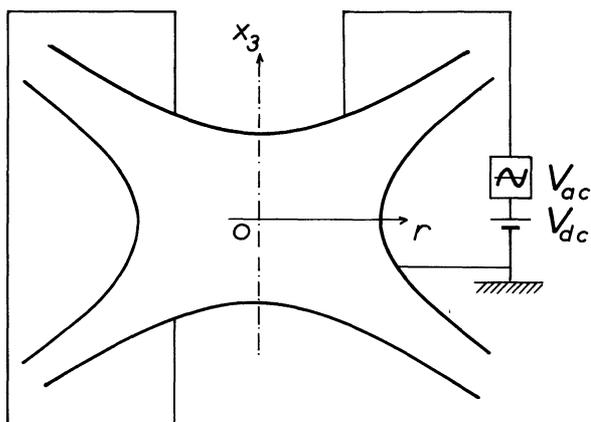


FIG. 1. — Schéma du dispositif expérimental.

Mathieu. Sous certaines conditions dépendant des valeurs V_{dc} , V_{ac} , Ω et du rapport (e/m) de la particule chargée, cette dernière possède un mouvement stable.

Posons :

$$q_3 = -2 q_2 = -2 q_1 = 4 \left(\frac{e}{m} \right) \frac{V_{ac}}{z_0^2 \Omega^2},$$

$$a_3 = -2 a_2 = -2 a_1 = 8 \left(\frac{e}{m} \right) \frac{V_{dc}}{z_0^2 \Omega^2},$$

$$\beta_i^2 = a_i + \frac{q_i^2}{2} \quad (i = 1, 2, 3),$$

$$\omega_i = \frac{\Omega \beta_i}{2} \quad (i = 1, 2, 3).$$

Nous nous plaçons dans les conditions généralement choisies lors des études en physique atomique, à savoir :

$$a_i \simeq 0 \quad (i = 1, 2, 3),$$

$$q_i \ll 1.$$

La loi du mouvement stable est alors sensiblement donnée par la formule :

$$x_i(t) = \frac{u_i}{\omega_i} \left[1 - \frac{q_i}{2} \cos(\Omega t) \right] \cos(\omega_i t - \varphi_i), \quad (i = 1, 2, 3)$$

$$\dot{x}_i(t) = u_i \left\{ \sqrt{2} \sin(\Omega t) \cos(\omega_i t - \varphi_i) - \left[1 - \frac{q_i}{2} \cos(\Omega t) \right] \sin(\omega_i t - \varphi_i) \right\}, \quad (i = 1, 2, 3)$$

avec la relation suivante :

$$\Omega \gg \omega_i \quad (i = 1, 2, 3).$$

Pour un mouvement parfaitement sinusoïdal φ_i serait la phase à l'origine de la projection du mouvement sur l'axe Ox_i , u_i serait la valeur maximale de la projection de la vitesse sur l'axe Ox_i , et l'énergie totale due au champ extérieur serait :

$$E_T = \frac{1}{2} m (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2).$$

Une propriété intéressante de la loi du mouvement de l'ion est que dans chacun des sous-espaces $(Ox_i, O\dot{x}_i)$, son point représentatif se situe sur l'ellipse d'équation :

$$\dot{x}_i - \left[\frac{\sqrt{2} \sin(\Omega t)}{1 - \frac{q_i}{2} \cos(\Omega t)} x_i \omega_i \right]^2 + (x_i \omega_i)^2 = u_i^2 \left[1 - \frac{q_i}{2} \cos(\Omega t) \right]^2. \quad (4)$$

Cette ellipse se déforme périodiquement à la fréquence $(\Omega/2\pi)$.

Lorsque a_i et q_i augmentent, l'expression (3) devient progressivement plus complexe, sans que soit remise en cause la validité des méthodes mathématiques décrites dans ce qui suit.

2.2 CHOIX DES PARAMÈTRES DU MOUVEMENT UTILISÉ. — En l'absence de charge d'espace et en l'absence de chocs, les quantités u_i et φ_i sont des constantes du mouvement. Nous considérons par la suite des ions dont l'état mécanique est entièrement déterminé à chaque instant par la donnée de $x_i(t)$ et $\dot{x}_i(t)$, ou ce qui revient au même, par la donnée de u_i et φ_i . On peut donc considérer qu'en l'absence de chocs, l'ion se trouve dans un état noté $|u, \varphi\rangle$ associé au multiplet $(u_1, u_2, u_3, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$. Une telle représentation permet également de traiter les problèmes liés aux temps de confinement. En effet, le vecteur u (de composantes u_1, u_2, u_3) fournit une bonne approximation de l'extension maximum de la projection du mouvement sur chaque axe. Puisque

$$\Omega \gg \omega_i \quad (i = 1, 2, 3),$$

cette extension suivant chaque axe est très voisine de :

$$\frac{u_i}{\omega_i} \left(1 + \frac{|q_i|}{2} \right).$$

En présence de molécules de gaz, l'ion peut subir des chocs et l'évolution du vecteur u en fonction du temps définit une fonction vectorielle $u(t)$. Cette fonction est une fonction en escalier (voir Fig. 2) car les seuls instants où $u(t)$ change de valeur correspondent aux chocs entre l'ion et les molécules de gaz (nous supposons la durée des collisions infiniment petite par rapport aux autres grandeurs temporelles intervenant dans cette étude, ce qui est toujours expérimentalement réalisé). Tant que les trois conditions

$$\left. \begin{aligned} u_1(t) &< \frac{r_0 \omega_1}{1 + \frac{|q_1|}{2}} \\ u_2(t) &< \frac{r_0 \omega_2}{1 + \frac{|q_2|}{2}} \\ u_3(t) &< \frac{z_0 \omega_3}{1 + \frac{|q_3|}{2}} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

sont vérifiées simultanément, l'ion reste confiné, mais dès que l'une au moins des trois conditions (5) n'est plus respectée, dans un délai très court qui suit le dernier choc, délai inférieur à $[2\pi/\inf(\omega_i)]$, l'ion touche l'une des parois de la trappe, se neutralise et n'intervient plus par la suite (voir Fig. 2). La durée

de vie (ou durée de confinement) τ dans la trappe est alors connue avec une incertitude relative inférieure à :

$$\frac{\Delta\tau}{\tau} = \frac{2\pi}{\tau \inf(\omega_i)},$$

incertitude faible si les chocs ne sont pas trop fréquents. Il faut pour cela que $\Delta\tau$ soit faible par rapport aux temps caractéristiques de l'évolution de l'état $|u, \varphi\rangle$ de l'ion, ou ce qui revient au même, que la probabilité pour qu'il y ait plus d'un choc pendant la durée d'une révolution dans la trappe soit négligeable. Cette hypothèse est réaliste puisque pour une trappe ayant des dimensions de l'ordre de quelques centimètres, elle impose que la pression des particules de gaz soit inférieure à 10^{-4} torr.

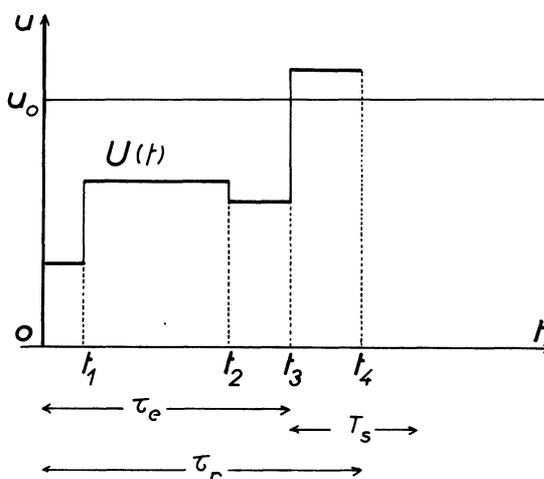


FIG. 2. — Evolution de $u(t)$. L'axe Ou représente l'ensemble des trois axes (Ou_1, Ou_2, Ou_3) et u_0 représente la réunion des trois états limites. t_1, t_2, t_3 : instants des chocs. t_4 : instant où l'on touche l'une des parois. τ^e : durée de confinement estimée. τ^r : durée vraie de confinement. τ_s : intervalle de temps nécessaire à une révolution de l'ion.

La résolution mathématique du problème à trois dimensions est complexe, et nous étudions dans un premier temps un modèle simplifié où les ions sont astreints à se déplacer uniquement suivant un axe Ox_3 . Toutes les équations concernant la troisième composante du mouvement restent valables, et nous supprimons par la suite l'indice 3 aux grandeurs intervenant dans ces équations. A l'évolution d'un ion déterminé est alors associée une fonction à valeur dans R^2 : $[u(t), \varphi(t)]$, qui ne change de valeurs qu'aux instants t_i où se produisent les chocs.

En réalité, il n'est pas possible d'étudier séparément l'évolution de chacun des ions et l'étude sera statistique. La fonction $[u(t), \varphi(t)]$ sera considérée comme un échantillon d'une fonction aléatoire $[U(t), \Phi(t)]$ qui peut prendre à chaque instant une valeur $[u, \varphi]$ correspondant à un état $|u, \varphi\rangle$. De la connaissance des propriétés statistiques de $[U(t), \Phi(t)]$ découle la connaissance des propriétés statistiques des grandeurs aléatoires associées

au confinement. On peut montrer (voir appendice A) qu'à chaque instant $\Phi(t)$ est sensiblement équirépartie sur $[0, 2\pi]$, de telle sorte que seules restent à étudier les propriétés statistiques de $U(t)$.

2.3 ETUDE DE $U(t)$ DANS LE CAS D'UNE TRAPPE DE DIMENSION INFINIE. — Dans un modèle à une dimension, il est évident que la notion de collision n'a pas de sens, c'est pourquoi nous calculerons l'intervalle de temps séparant deux chocs successifs dans l'espace réel, en supposant tous les chocs frontaux, de telle sorte que l'ion considéré soit astreint à rester sur l'axe privilégié, suivant une méthode exposée dans la référence [8]. L'indice 1 sera réservé aux grandeurs attachées à l'ion, l'indice 2 aux grandeurs attachées aux molécules. Soit :

— $T_s = \frac{2\pi}{\omega}$, la période du mouvement séculaire ;

— $T_m = \frac{2\pi}{\Omega}$, la période du mouvement micro-métrique ;

— ρ_2 , la densité moyenne de gaz neutre ;

— $f_{\dot{x}}(\dot{x}_2) = \frac{1}{\sigma_2 \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\dot{x}_2^2}{2\sigma_2^2}\right)$, la densité de probabilité de la vitesse des molécules, supposées être en équilibre thermodynamique à la température T_2 ; et

— s , la section efficace moyenne de collisions élastiques entre les ions et le gaz moléculaire, pour le domaine des énergies considérées. Ceci revient à supposer la section efficace de choc indépendante de l'énergie. Nous excluons donc le cas de chocs où des phénomènes de résonance quantique existent (tels les chocs électrons-atomes).

Nous supposons que dans le plan $(Ox, O\dot{x})$, les molécules se distribuent suivant un processus de Poisson de densité $\rho_2 f_{\dot{x}}(\dot{x}_2)$. Rappelons que nous supposons que les molécules forment un milieu dilué, de sorte que l'intervalle de temps moyen entre deux chocs successifs est supérieur à T_s , et que la durée d'interaction entre un ion et une molécule est négligeable devant T_m . Ces hypothèses entraînent que le processus qui est associé à la fonction aléatoire $U(t)$ est un processus de Markov dont l'ensemble des états possibles est noté $E_0 = \{|u\rangle\}$ (ensemble de valeurs associées : $[0, \infty]$). $U(t)$ est associée à un processus permanent, car elle peut changer de valeur à n'importe quel instant, mais non homogène, car les propriétés statistiques de la modification intervenant sur l'état $|u\rangle$ dépendent de l'instant du choc. Rappelons qu'un intervalle de temps de l'ordre de T_m est très petit devant les temps caractéristiques de l'évolution de l'état d'un ion, si bien qu'il est inutile pour le problème considéré de s'intéresser à l'évolution de $U(t)$ pour tout intervalle de temps δt inférieur à T_m .

Nous ne nous intéressons donc qu'à la suite des

instants $t_0=0$; $t_1=T_m$; $t_2=2T_m$; ... ; $t_k=kT_m$; ... L'intérêt d'une telle méthode est que pour toute suite d'instants $t_0, t_1, \dots, t_k, \dots$, le processus qui est associé à $U(t)$ forme une chaîne de Markov homogène. Pour ces instants, $U(t)$ est entièrement caractérisée, une fois la répartition de probabilité initiale posée :

$$\Pi_i(u) = \Pr [U(0) = u] \quad \forall u,$$

et connue l'expression des probabilités de transition élémentaires :

$$p(u_f, k/u_i) \delta u_f = \Pr [U(t_k) \in (u_f, u_f + \delta u_f) / U(t_{k-1}) = u_i] \quad \forall u_i, u_f.$$

Considérons un choc se produisant durant l'intervalle de temps infiniment petit $(t, t + \delta t)$, et supposons que juste avant, l'ion se trouve dans un état $|u_i, \varphi\rangle$ associé à la valeur $[u_i, \varphi]$. L'éq. (4) considérée juste avant et après le choc permet d'obtenir l'accroissement de vitesse qu'il faut fournir à l'ion passé sur un état $|u_f\rangle$ de valeur u_f . (Il y a, en fait, deux accroissements de vitesses possibles, ainsi que le montre la figure 3.) En considérant alors

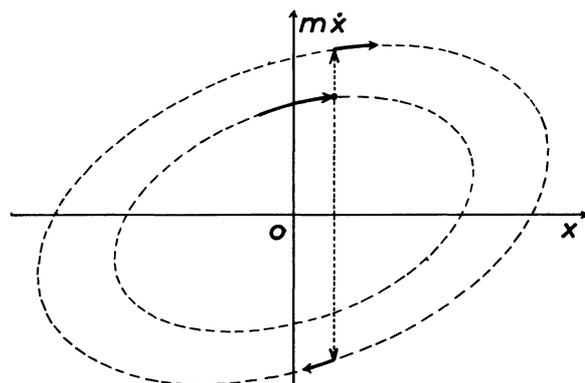


FIG. 3. — Représentation de l'effet d'un choc dans l'espace des phases.

que les chocs sont frontaux, nous obtenons l'expression des vitesses possibles pour aboutir sur l'état $|u_f\rangle$:

$$\dot{x}_{2\pm} = u_i \left[(\mu - 1) \left(1 - \frac{q}{2} \cos \Omega t \right) \sin(\omega t - \varphi) + \sqrt{2} \sin \Omega t \cos(\omega t - \varphi) \pm \left(1 - \frac{q}{2} \cos \Omega t \right) \sqrt{\left(\frac{u_f}{u_i} \right)^2 - \cos^2(\omega t - \varphi)} \right], \quad (6)$$

$$\mu = \frac{m_1 + m_2}{2 m_2}.$$

Durant l'intervalle de temps considéré, tout choc avec une molécule ayant une vitesse de valeur comprise entre \dot{x}_{2-} et \dot{x}_{2+} mettra donc l'ion sur un état $|u\rangle$ de valeur inférieure à u_f . Si nous admettons que durant un intervalle de temps T_m , la probabilité pour qu'il y ait deux chocs est négligeable, la

probabilité pour que l'ion passe d'un état $|u_i, \varphi\rangle$ de valeur $[u_i, \varphi]$, vers un état $|u\rangle$ (sans s'occuper de la valeur de la phase finale) de valeur inférieure à u_f , sera la somme des probabilités obtenues pour chacun des intervalles de temps élémentaires $(t, t + \delta t)$. Enfin, puisque la phase initiale φ n'est pas connue, mais est équirépartie sur $(0, 2\pi)$ la probabilité pour que l'ion passe durant un intervalle de temps (t_{k-1}, t_k) d'un état $|u_i\rangle$ de valeur u_i , vers un état $|u\rangle$ de valeur inférieure à u_f à la suite d'un choc est :

$$P_c(u_f, k/u_i) = \frac{\rho_2 s}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{\dot{x}_{2-}}^{\dot{x}_{2+}} \times \\ \times |\dot{x}_2 - \dot{x}_1 | f_{\dot{x}}(\dot{x}_2) d\varphi dt d\dot{x}_2. \quad (7)$$

La probabilité pour que l'ion se trouve dans un état de valeur inférieure à u_f , à l'instant t_k , s'il était dans l'état $|u_i\rangle$ à l'instant t_{k-1} est donc :

$$P(u_f, k/u_i) = P_c(u_f, k/u_i) + H(u_f - u_i) [1 - P_c(\infty, k/u_i)].$$

Il suffit de dériver l'expression ci-dessus par rapport à u_f , pour obtenir l'expression des probabilités de transition élémentaires soit :

$$p_0(u_f, k/u_i) = p_c(u_f, k/u_i) + \\ + \delta(u_f - u_i) [1 - P_c(\infty, k/u_i)] \quad (8)$$

$$p_c(u_f, k/u_i) = \frac{\rho_2 s}{2\pi} \times \\ \times \int_0^{2\pi} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left[|\dot{x}_{2+} - \dot{x}_1 | f_{\dot{x}}(\dot{x}_{2+}) \frac{\partial \dot{x}_{2+}}{\partial u_f} \right. \\ \left. - |\dot{x}_{2-} - \dot{x}_1 | f_{\dot{x}}(\dot{x}_{2-}) \frac{\partial \dot{x}_{2-}}{\partial u_f} \right] d\varphi dt, \quad (9)$$

expression dans laquelle \dot{x}_{2+} et \dot{x}_{2-} sont exprimées en fonction de u_f, u_i, φ, t , grâce à l'éq. (6). Il suffit, dans ces expressions, d'effectuer le changement de variables :

$$(\varphi, t) \rightarrow (\alpha = \Omega t, \beta = \omega t - \varphi),$$

pour s'assurer que (7) et (8) ne dépendent pas de k , c'est-à-dire que la chaîne de Markov est homogène.

Une discussion sur les limites de validité des expressions calculées, compte tenu des hypothèses simplificatrices qui ont été faites, est abordée dans l'appendice A.

2.4 ETUDE DE $U(t)$ DANS LE CAS D'UNE TRAPPE DE DIMENSION FINIE. — Il existe alors un état $|u_0\rangle$, associé à la valeur :

$$u_0 = \frac{z_0 \omega}{1 + \frac{|q|}{2}}$$

qui est tel que pour toute valeur de $U(t)$ supérieure, l'ion ne peut plus être confiné, et n'intervient plus

par la suite. L'ensemble des états $|u\rangle$ accessibles à l'ion confiné est donc, d'une part un ensemble d'états E_c associé à un ensemble de valeurs de $u : [0, u_0[$ (à l'intérieur de cet ensemble, toute transition d'un état initial vers un ensemble élémentaire d'états finals possède une probabilité élémentaire donnée par les éq. (7) et (8)), d'autre part l'état $|u_0\rangle$ qui est un état absorbant, et qui est tel que la probabilité associée à la transition d'un état $|u_i\rangle \in E_c$ vers l'état $|u_0\rangle$ est :

$$\int_{u_0}^{\infty} p_c(u_f/u_i) du_f.$$

Les probabilités de transition dans le cas d'une trappe de dimension finie seront donc données par :

$$\left. \begin{aligned} p(u_f/u_i) &= p_c(u_f/u_i) + \delta(u_f - u_i) \times \\ &\times [1 - P_c(\infty/u_i)] \quad \forall u_i, u_f < u_0, \\ p(u_0/u_i) &= \int_{u_0}^{\infty} p_c(u_f/u_i) du_f = P_c(\infty/u_i) - \\ &- P_c(u_0/u_i) \quad \forall u_i < u_0, \\ p(u_0/u_0) &= 1, \\ p(u_f/u_0) &= 0 \quad \forall u_f < u_0. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Il faut noter que $U(t)$ décrit l'évolution aléatoire d'un seul ion, mais, du fait de l'absence supposée de phénomènes collectifs, $U(t)$ décrit en même temps l'évolution d'une population d'ions de même nature et créés au même instant.

3. Etude des équations. — La connaissance des propriétés de $U(t)$ permet d'étudier toute grandeur liée au confinement. Dans ce qui suit, nous nous intéresserons à trois types de problèmes fondamentaux. Nous nous préoccuperons d'abord du temps que doit attendre chaque ion avant d'être éjecté. Les grandeurs statistiques associées sont importantes car elles définissent la qualité de la méthode de confinement. Nous nous intéresserons également à l'évolution de l'état d'un ion pendant sa durée de confinement. Cette étude permet de fournir des indications sur les propriétés énergétiques et cinématiques d'une population d'ions évoluant librement. Enfin, pour tenir compte du cas le plus général de fonctionnement d'une trappe, dans lequel des ions sont créés en permanence, nous établirons une méthode permettant d'étudier ce type de problème. Nous pourrions alors étudier l'évolution du nombre d'ions confinés.

3.1 ETUDE DU TEMPS DE CONFINEMENT D'UN ION. — Intéressons-nous à la variable aléatoire $\tau(u)$ qui décrit la durée de vie (ou temps de confinement) d'un ion créé à l'instant origine sur l'état $|u\rangle$, et calculons la caractéristique de sa loi :

$$\varphi_c(u, \theta) = E \{ \exp |i\theta\tau(u)| \}. \quad (11)$$

Posons :

$$\rho_c(v, k/u) = \rho_2 s T_m \gamma_0(v, u)$$

(ρ_c défini dans l'éq. (9) ne dépend pas de k)

$$I_0(u) = \int_0^\infty \gamma_0(v, u) dv$$

($\rho_2 s I_0(u)$ représente la densité moyenne d'interaction pour un ion sur l'état $|u\rangle$),

$$\alpha_0(u) = \int_{u_0}^\infty \gamma_0(v, u) dv$$

($\rho_2 s \alpha_0(u)$ représente la densité moyenne d'absorption à partir d'un état $|u\rangle$).

Les hypothèses faites sur la nature des chocs et les propriétés de $U(t)$ montrent que la loi de la durée de vie d'un ion sur un état $|u\rangle$ est identique à sa loi de survie sur cet état à partir de n'importe quel instant t_k . Cette remarque permet de calculer facilement une équation dont φ_c est solution. Si à l'instant origine, l'ion créé sur l'état $|u\rangle$ a une durée de vie $\tau(u)$, à l'instant T_m , suivant que l'ion est dans l'une des trois situations suivantes : pas d'interaction, interaction non absorbante, interaction absorbante (probabilités respectives :

$$[1 - \rho_2 s T_m I_0(u)], [\rho_2 s T_m \gamma_0(v, u) dv], [\rho_2 s T_m \alpha_0(u)],$$

il aura une durée aléatoire de vie respectivement égale à :

$$[\tau(u) + T_m], [\tau(v) + T_m], [\varepsilon(u) T_m, \varepsilon(u) < 1].$$

Nous pouvons alors exprimer l'équation de bilan suivante :

$$\begin{aligned} E[\exp[i\theta\tau(u)]] &= E[\exp\{i\theta[\tau(u) + T_m]\}] \times \\ &\times [1 - \rho_2 s T_m I_0(u)] + \int_0^{u_0} E\{\exp\{i\theta[\tau(v) + T_m]\}\} \\ &\times \rho_2 s T_m \gamma_0(v, u) dv + E\{\exp[i\theta\varepsilon(u) T_m]\} \rho_2 s T_m \alpha_0(u), \end{aligned}$$

ou encore, compte tenu de (11) :

$$\begin{aligned} \varphi_c(u, \theta) &= \exp(i\theta T_m) \varphi_c(u, \theta) [1 - \rho_2 s T_m I_0(u)] + \\ &+ \exp(i\theta T_m) \int_0^{u_0} \varphi_c(v, \theta) \rho_2 s T_m \gamma_0(v, u) dv \\ &+ E\{\exp[i\theta\varepsilon(u) T_m]\} \rho_2 s T_m \alpha_0(u). \end{aligned} \quad (12)$$

Puisque nous avons fait l'hypothèse que T_m est très petit devant les temps caractéristiques de l'évolution d'un ion, nous pouvons dans l'éq. (12) effectuer un développement limité au premier ordre par rapport à T_m , et obtenir une équation dont φ_c est solution :

$$\begin{aligned} - \int_0^{u_0} \varphi_c(v, \theta) \gamma_0(v, u) dv - \frac{i\theta}{\rho_2 s} \varphi_c(u, \theta) + \\ + \varphi_c(u, \theta) I_0(u) = \alpha_0(u) \end{aligned} \quad (13)$$

ou encore :

$$\begin{aligned} - \int_0^{u_0} \varphi_0(v, \theta_0) \gamma_0(v, u) dv - i\theta_0 \varphi_0(u, \theta_0) + \\ + \varphi_0(u, \theta_0) I_0(u) = \alpha_0(u) \quad (14) \\ \varphi_c(u, \theta) = \varphi_0\left(u, \frac{\theta}{\rho_2 s}\right). \end{aligned}$$

La transformation réciproque de Fourier, effectuée sur (14) permet alors d'obtenir une équation dont la densité f_τ de $\tau(u)$ est solution :

$$\begin{aligned} - \int_0^{u_0} f_0(v, x) \gamma_0(v, u) dv + f_0(u, x) I_0(u) = \\ = - \frac{\partial f_0(u, x)}{\partial x} \quad (15) \\ \left. \begin{aligned} f_0(u, 0) &= \alpha_0(u) \\ f_\tau(u, t) &= \rho_2 s f_0(u, \rho_2 s t). \end{aligned} \right\}$$

L'éq. (15) permet en particulier de déterminer, à chaque instant, le taux de décroissance d'une population d'ions créés à l'instant initial suivant une répartition de probabilité connue et égale à $\Pi_i(u)$. En effet, ce taux (noté par la suite $n(t)$) est, à chaque instant, égal à la probabilité qu'a un ion d'être confiné, soit :

$$\begin{aligned} n_0(y) &= \int_0^{u_0} \Pi_i(u) \left[\int_y^\infty f_0(u, x) dx \right] du \\ n(t) &= n_0(\rho_2 s t). \end{aligned} \quad (16)$$

L'expression (16) montre que sous les hypothèses faites, le taux de décroissance ne dépend que du produit ($\rho_2 s t$).

L'expérience montre qu'il existe un temps de relaxation pour un ensemble de particules confinées, c'est-à-dire que pour des valeurs très grandes de t , $n(t)$ est de la forme :

$$n(t) = c \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right),$$

où τ définit le temps de relaxation du système. Il peut être intéressant de définir la *qualité* du confinement par τ . Théoriquement la grandeur $1/\tau$ s'introduit comme solution de l'équation aux valeurs propres déduite de (15) : $1/\tau$ est la plus petite des solutions de :

$$\begin{aligned} - \int_0^{u_0} f_p(v) \gamma_0(v, u) dv + f_p(u) I_0(u) = \frac{1}{\tau_0} f_p(u) \\ \tau = \frac{\tau_0}{\rho_2 s}. \end{aligned} \quad (17)$$

Il peut se faire que l'information dont on a besoin soit intermédiaire entre l'information fournie par τ , et l'information fournie par f_τ . Il est alors utile d'ef-

fectuer une étude approchée de la loi de $\tau(u)$ en calculant les premiers moments. En particulier, le premier moment de $\tau(u)$ fournit un critère sur la *qualité* du confinement qui dépend de l'état sur lequel l'ion est créé. Tous les moments de $\tau(u)$ existent, car $f_0(u, x)$ est asymptotiquement équivalente à $\exp(-x/\tau_0)$. Nous pouvons donc exprimer $\varphi_0(u, \theta_0)$ en fonction des moments de $\tau(u)$ notés $m_k(u)$:

$$\varphi_0(u, \theta_0) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\theta_0)^k}{k!} \mu_k(u) \quad (18)$$

$$m_k(u) = \mu_k(u) / (\rho_2 s)^k .$$

L'expression (18), portée dans l'éq. (14), transforme celle-ci en une série entière identiquement nulle. En annulant chacun des coefficients de θ_0^k , nous obtenons le système hiérarchique d'équations dont les moments sont solutions :

$$\left. \begin{aligned} - \int_0^{u_0} \mu_k(v) \gamma_0(v, u) dv + \mu_k(u) I_0(u) &= k \mu_{k-1}(u) \\ k &= 1, 2, 3 \dots \end{aligned} \right\} (19)$$

$$m_k(u) = \frac{\mu_k(u)}{(\rho_2 s)^k} \quad k = 1, 2, 3 \dots$$

Il faut noter que le système d'éq. (19) permet de retrouver le temps de relaxation. En effet, μ_k est défini par :

$$\mu_k(u) = \int_0^{\infty} x^k f_0(u, x) dx .$$

Cette expression montre que lorsque k croît, ce sont des valeurs de plus en plus grandes de x qui contribuent *efficacement* au calcul de $\mu_k(u)$. Puisque $f_0(u, x)$ est de la forme :

$$\left. \begin{aligned} f_0(u, x) &= \psi_0(u, x) \frac{1}{\tau_0} e^{-x/\tau_0} \\ \lim_{x \rightarrow \infty} \psi_0(u, x) &= C_0(u) \end{aligned} \right\} (20)$$

$\mu_k(u)$ tend à se rapprocher (au facteur $C_0(u)$ près et lorsque k augmente) du k -ième moment d'une loi exponentielle (qui vaut $k! \tau_0^k$). Nous pouvons donc écrire :

$$\left. \begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k} \frac{\mu_k(u)}{\mu_{k-1}(u)} &= \tau_0 \\ \tau &= \frac{\tau_0}{\rho_2 s} . \end{aligned} \right\} (21)$$

Pratiquement, l'expression (21) permet de trouver une estimation précise de τ_0 pour de faibles valeurs de k .

3.2 ETUDE DE L'ÉVOLUTION DE L'ÉTAT D'UN ION CONFINÉ. — Soit un ion créé à l'instant initial dans l'état $|w\rangle$, et soit $\Pi(w, u, t)$, la densité de probabilité

qui décrit la loi de la répartition suivant $|u\rangle$ de l'ion à l'instant t . Puisque $U(t)$ est une chaîne de Markov homogène pour toute suite d'instants t_k , $\Pi(w, u, t_k)$ se déduit de $\Pi(w, u, t_{k-1})$ par :

$$\Pi(w, u, t_k) = \int_0^{u_0} p_c(u, v) \Pi(w, v, t_{k-1}) dv + \Pi(w, u, t_{k-1}) \left[1 - \int_0^{\infty} p_c(v, u) dv \right] .$$

Si nous introduisons les quantités $\gamma_0(v, u)$ et $I_0(u)$ définies dans le paragraphe 3.1, nous obtenons l'équation :

$$- \int_0^{u_0} \gamma_0(u, v) \Pi(w, v, t_{k-1}) dv + \Pi(w, u, t_{k-1}) \times I_0(u) = - \frac{\Pi(w, u, t_k) - \Pi(w, u, t_{k-1})}{\rho_2 s T_m} , u < u_0 .$$

Puisque nous avons supposé que T_m était très petit devant les temps caractéristiques de l'évolution d'un ion, nous pouvons assimiler le deuxième membre de l'équation précédente à la dérivée de Π par rapport au temps, et écrire que cette expression est vérifiée pour toute valeur de t , nous obtenons alors, en introduisant la variable $x = \rho_2 st$:

$$\left. \begin{aligned} - \int_0^{u_0} \Pi_0(w, v, x) \gamma_0(u, v) dv + \Pi_0(w, u, x) I_0(u) &= - \frac{\partial \Pi_0(w, u, x)}{\partial x} , u < u_0 , \\ \Pi_0(w, u_0, x) &= 1 - \int_0^{u_0} \Pi_0(w, u, x) du , \\ \Pi(w, u, t) &= \Pi_0(w, u, \rho_2 st) , \forall u . \end{aligned} \right\} (22)$$

Si nous voulons connaître la loi de répartition de l'ion sur l'ensemble des états $|u\rangle$, pour une répartition de probabilité initiale $\Pi_i(w)$, il suffit alors de calculer :

$$\int_0^{u_0} \Pi(w, u, t) \Pi_i(w) dw .$$

Nous pouvons remarquer que (22) est l'équation adjointe de (15), de sorte que $1/\tau_0$ (inverse du temps de relaxation) est également la plus petite des valeurs propres de l'opérateur :

$$- \int_0^{u_0} [] \gamma_0(u, v) dv + [] I_0(u) .$$

Il existe donc sur l'ensemble des états $|u\rangle$ autres que l'état absorbant une loi de répartition asymptotique notée $\Pi_a(u)$, qui est la fonction propre de l'opé-

rateur précédent, associée à la valeur propre $1/\tau_0$, et qui vérifie

$$\left. \begin{aligned} - \int_0^{u_0} \Pi_a(v) \gamma_0(u, v) dv + \\ + \Pi_a(u) I_0(u) = \frac{1}{\tau_0} \Pi_a(u), \\ \int_0^{u_0} \Pi_a(u) du = 1 \\ \tau_0 = \rho_2 s \tau. \end{aligned} \right\} (23)$$

La répartition asymptotique définie par Π_a est indépendante de la loi de la répartition initiale, et ne dépend pas de $\rho_2 s$. En pratique, $\Pi_a(u)$ peut très rapidement être une bonne approximation de la densité de probabilité de la loi de répartition d'un ion sur l'ensemble des états non absorbants, d'où son intérêt.

Si nous intégrons (23) par rapport à u , nous obtenons une relation qui lie le temps de relaxation et la densité de probabilité $\Pi_a(u)$:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{\tau_0} = \int_0^{u_0} \alpha_0(u) \Pi_0(u) du, \\ \tau = \frac{\tau_0}{\rho_2 s}. \end{aligned} \right\} (24)$$

3.3 ETUDE DU NOMBRE D'IONS CONFINÉS. — Lorsque les ions sont introduits de façon continue dans le champ de confinement, il est aisé d'établir une équation faisant effectivement intervenir la densité de la population. Du fait de l'absence de phénomène collectif les ions se répartissent sur l'ensemble des états possibles $|u\rangle$ suivant un processus de Poisson dont la densité à chaque instant sera notée $\rho(u, t)$. Les ions sont également créés suivant un processus de Poisson et nous noterons $\rho_c(u, t)$, la moyenne sur T_m de la densité de ce processus (car nous ne définissons le paramètre *temps* qu'à une incertitude T_m près). Les mêmes hypothèses et les mêmes méthodes utilisées précédemment conduisent à l'établissement d'une équation dont ρ est solution :

$$\left. \begin{aligned} - \int_0^{u_0} \rho(v, t) \gamma_0(u, v) dv + \rho(u, t) I_0(u) = \\ = - \frac{1}{\rho_2 s} \frac{\partial \rho(u, t)}{\partial t} + \frac{1}{\rho_2 s} \rho_c(u, t), \quad u < u_0 \\ \frac{\partial \rho(u_0, t)}{\partial t} = \rho_2 s \int_0^{u_0} \rho(u, t) \alpha_0(u) du. \end{aligned} \right\} (25)$$

Il nous semble toutefois plus simple d'utiliser les résultats de l'éq. (22).

En effet, $\rho(u, t)$ et $\Pi(w, u, t)$ sont liés pour tout u inférieur à u_0 par l'équation :

$$\rho(u, t) = \int_{-\infty}^t \int_0^{u_0} \rho_c(w, \theta) \Pi(w, u, t - \theta) d\theta dw.$$

D'où l'ensemble des expressions permettant de déduire ρ à partir de Π et de ρ_c :

$$\left. \begin{aligned} \rho_0(u, x) = \int_0^{-\infty} \int_0^{u_0} \rho_{0c}(w, x - y) \times \\ \times \Pi_0(w, u, y) dy dw, \quad u < u_0, \\ \frac{\partial \rho_0(u_0, x)}{\partial x} = \int_0^{u_0} \rho_0(u, x) \alpha_0(u) du, \\ \Pi_0(w, u, x) = \Pi\left(w, u, \frac{x}{\rho_2 s}\right), \\ \rho_{0c}(w, x) = \frac{1}{\rho_2 s} \rho_c\left(w, \frac{x}{\rho_2 s}\right), \\ \rho(u, t) = \rho_0(u, \rho_2 s t). \end{aligned} \right\} (26)$$

Le nombre total d'ions confinés : $\rho(t)$ est à chaque instant l'intégrale de $\rho(u, t)$ par rapport à u . Nous pouvons donc étudier comment évolue le nombre total d'ions au cours du temps. Le cas qui se présente le plus couramment est, outre le cas d'une évolution libre en l'absence d'ions créés, que permet d'étudier l'éq. (16), celui où des ions sont créés en permanence avec une densité moyenne ρ_c constante. Une fois le régime permanent atteint, le nombre d'ions confinés est donné par la formule :

$$\rho = \int_0^{u_0} \rho_c(u) m_1(u) du \quad (27)$$

où $m_1(u)$ est la durée de vie moyenne d'un ion, définie en (19).

3.4 CONCLUSION. — Les éq. (3) et (4) montrent qu'à chaque instant, la transformation $(u, \varphi) \rightarrow (x, \dot{x})$ est biunivoque. L'étude de $U(t)$ permet donc de décrire comment évolue l'état $|x, m\dot{x}\rangle$ d'un ion confiné dans l'espace des phases. L'information obtenue par cette méthode est équivalente à celle que donnerait la résolution d'une équation d'évolution classique, mais son intérêt réside dans la souplesse d'utilisation qu'elle présente, pour obtenir les grandeurs utiles. Elle permet pour chaque étude particulière de trouver la quantité d'information nécessaire afin d'obtenir une équation spécifique dont la structure est mathématiquement simple. En particulier, celles qui ont été obtenues dans ce qui précède sont linéaires et la généralisation dans le cas du modèle à trois dimensions est immédiate.

4. Réalisme du modèle. — Afin de tester le réalisme du modèle, nous avons effectué des expériences numériques permettant une comparaison avec des résultats expérimentaux, et ce pour les caractéristiques

de la trappe qui sont habituellement utilisées en physique atomique, soit : a pratiquement nul (ici, a est nul), q petit (nous avons pris 0,2 pour valeur de q), et u_0 inférieur à 1 000 m/s. Les ions considérés sont des ions de césium positifs, qui ont la configuration électronique d'atomes de gaz rares. Les chocs peuvent provenir de trois types de molécules de gaz rares, toutes supposées en équilibre Maxwellien à 300 K : hélium, néon, xénon. Il est alors réaliste de supposer que les collisions sont élastiques et que la section efficace est pratiquement constante dans le domaine énergétique considéré.

4.1 ETUDE DES PROPRIÉTÉS CINÉMATIQUES DES IONS CONFINÉS. — L'utilisation des techniques de confinement pour des études de physique atomique nécessite la connaissance de la loi de distribution des ions confinés. La connaissance exacte résulte de l'intégration de l'éq. (22), mais ceci nécessite de connaître la loi de répartition initiale. Par contre, une étude préliminaire a montré que dans de nombreux cas, le temps de réorganisation de la population était très faible devant le temps de confinement, de telle sorte que la loi de répartition exacte est très voisine de la loi de répartition asymptotique donnée par Π_a .

L'étude numérique montre que la zone où Π_a prend des valeurs notables dépend assez peu de la nature des molécules et de la valeur u_0 de l'état absorbant (Fig. 4). Elle montre aussi que Π_a s'approche de la fonction :

$$\Pi_l = \frac{u}{\sigma_1^2} \exp\left(-\frac{u^2}{2\sigma_1^2}\right), \quad u \geq 0, \sigma_1 = \sqrt{\frac{kT_2}{m_1}} \tag{28}$$

lorsque u_0 croît. Ce résultat indique qu'il est possible dans certaines conditions d'effectuer une *approche thermodynamique* du problème dans le cas d'une trappe de grande dimension (voir appendice B).

Ce qui précède montre que nous pouvons obtenir une approximation (d'autant meilleure que u_0 est grand) de propriétés statiques des grandeurs qui ne dépendent pas de façon sensible de la queue de la courbe représentant Π_a , en remplaçant la distribution réelle par la distribution limite. C'est ainsi que nous avons effectué une étude approchée de la loi de la vitesse \dot{X} des ions. Cette étude montre que \dot{X} suit sensiblement une loi de Gauss centrée et dont la dispersion est très voisine de

$$\sigma_{\dot{X}}(t) = \sigma_{\dot{X}}(t) = \sigma_1 [1 + 2 \sin^2(\Omega t)]^{1/2} .$$

La dispersion est donc une fonction périodique du temps, mais à chaque instant, la distribution des vitesses est celle d'une population en équilibre thermodynamique dont la température serait :

$$T_i(t) = T_2(1 + 2 \sin^2 \Omega t) .$$

En présence de chocs élastiques, l'énergie des ions devient vite de l'ordre de grandeur de l'énergie ther-

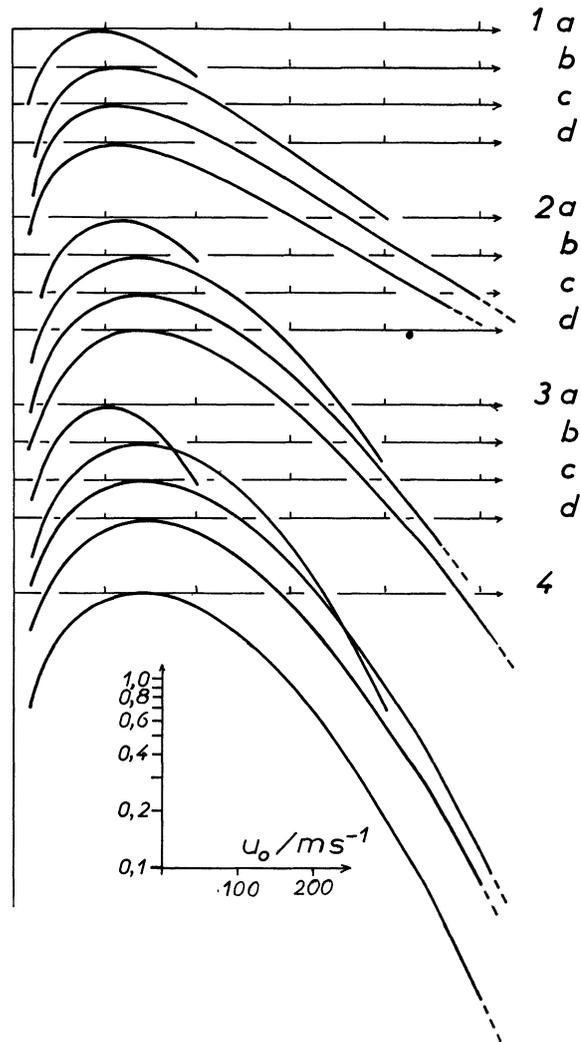


FIG. 4. — Influence de la nature du gaz et de la valeur u_0 de l'état absorbant sur la loi de répartition asymptotique des ions. La courbe 4 représente $\{ \Pi_a / \text{Sup}(\Pi_a) \}$. Les autres courbes représentent $\{ \Pi_a / \text{Sup}(\Pi_a) \}$ pour les conditions suivantes : gaz de xénon et $u_0 = 200, 400, 600, 800$ m/s (Fig. 1a à 1d); gaz de néon et mêmes valeurs de u_0 (Fig. 2a à 2d); gaz d'hélium et mêmes valeurs de u_0 (Fig. 3a à 3d).

mique du gaz. Ceci explique la possibilité d'utiliser des méthodes bolométriques [9]. Les résultats expérimentaux qui permettent une comparaison avec nos résultats théoriques sont rares. On trouve toutefois dans la référence [10], un calcul qui confirme nos conclusions : en étudiant le taux de recombinaison de deux espèces d'ions confinés simultanément dans une trappe, il a été trouvé une valeur numérique de ce taux qui, aux imprécisions expérimentales près, est compatible avec la valeur donnée par G. Fisk [12] pour les énergies thermiques.

4.2 AMÉLIORATION DU CONFINEMENT PAR L'UTILISATION D'UN GAZ LÉGER. — L'éq. (21) montre que si un ion isolé pouvait rester confiné pendant un temps infini, l'introduction d'un gaz neutre ne pourrait que limiter sa durée de vie. Toutefois, il n'en est jamais ainsi, car même si nous supposons la trappe parfaite

et même si nous négligeons les phénomènes collectifs, il y a toujours des chocs avec des molécules de gaz résiduel dont les masses sont comparativement élevées ; l'évolution d'un ion est alors sensiblement celle étudiée dans le cas où les ions de césium sont soumis à des chocs avec des molécules de xénon. Ce type de collision est néfaste car il réduit fortement le temps de confinement.

On peut améliorer la qualité du confinement en introduisant volontairement dans la trappe une faible quantité de molécules légères (gaz tampon). Affectons de l'indice 2 les grandeurs relatives au gaz résiduel, et de l'indice 3, celles relatives au gaz tampon, et posons :

$$R = \frac{\rho_3 s_3}{\rho_2 s_2}.$$

A chaque instant, la fonction Π_0 décrivant la loi de répartition des ions confinés dépend de la pression partielle du gaz tampon, donc de R . Au fur et à mesure que R croît, cette fonction tend vers la fonction Π_0 associée à la seule présence du gaz tampon. Supposons de plus que σ_1 soit très inférieur à la valeur u_0 de l'état absorbant, c'est-à-dire que nous sommes dans le cas où les fonctions de distributions pour tout R ont l'allure de la figure 5a. Lorsque R croît, l'amplitude de ces fonctions dans la zone périphérique diminue. Il en est de même de la densité d'absorption $\alpha_0(u)$. Enfin τ_0 se déplace sur la droite d'équation $u = u_0$,

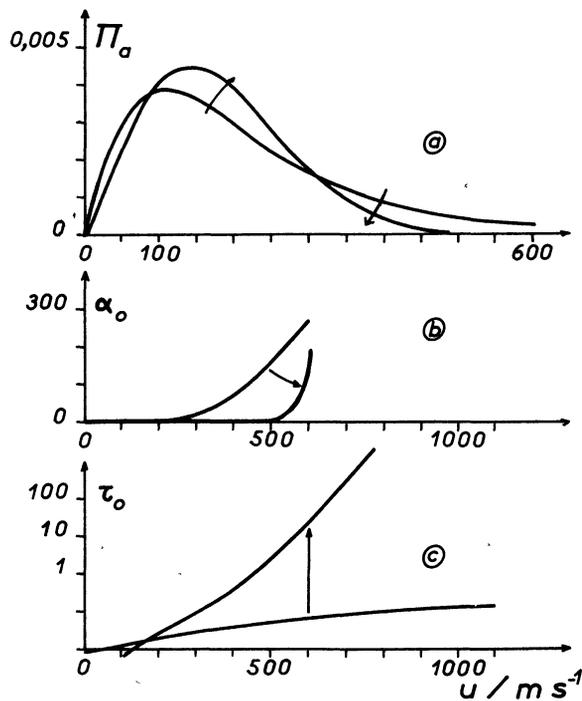


FIG. 5. — Influence de l'introduction d'un gaz tampon sur la loi de répartition asymptotique d'un ion (Fig. 8a), sur la densité d'absorption : α_0 (Fig. 8b), et sur le temps de confinement réduit : τ_0 (Fig. 8c). Les flèches indiquent dans quel sens évoluent les grandeurs représentées lorsque la pression de gaz tampon passe de la valeur 0 (courbes initiales) et croît jusqu'à tendre vers ∞ (courbes finales). Conditions de l'étude numérique : $u_0 = 600$ m/s ; mélange ternaire $\text{Cs}^+ \text{-Xe-He}$.

jusqu'à occuper le point qui correspond à la présence du gaz tampon seul. Nous avons représenté cette évolution dans la figure 5. La variation de τ_0 tend à augmenter le temps de confinement réel τ , mais l'augmentation simultanée de la fréquence de collision tend à l'abaisser de sorte que, suivant les conditions expérimentales, τ peut croître ou décroître.

Nous avons calculé pour deux mélanges ternaires : (Cs^+ , Xe, He) et (Cs^+ , Xe, Ne) la valeur de la durée de vie pour un ion créé au centre : $m_1(R, 0)$. Cette quantité est analogue à τ et s'obtient plus facilement. Elle est solution d'une équation qui généralise l'éq. (19), qui s'obtient par des méthodes analogues et dont l'expression est :

$$\left. \begin{aligned} & - \int_0^{u_0} g_{u_0}(R, v) [\gamma_{02}(v, u) + R\gamma_{03}(v, u)] \times \\ & \times dv + g_{u_0}(R, u) [I_{02}(u) + RI_{03}(u)] = 1, \end{aligned} \right\} (29)$$

$$m_1(u_0, R, u) = \frac{g_{u_0}(R, u)}{\rho_2 s_2}.$$

La quantité $Q(u_0, R)$, définie par :

$$Q(u_0, R) = \frac{g_{u_0}(R, 0)}{g_{u_0}(0, 0)}, \quad (30)$$

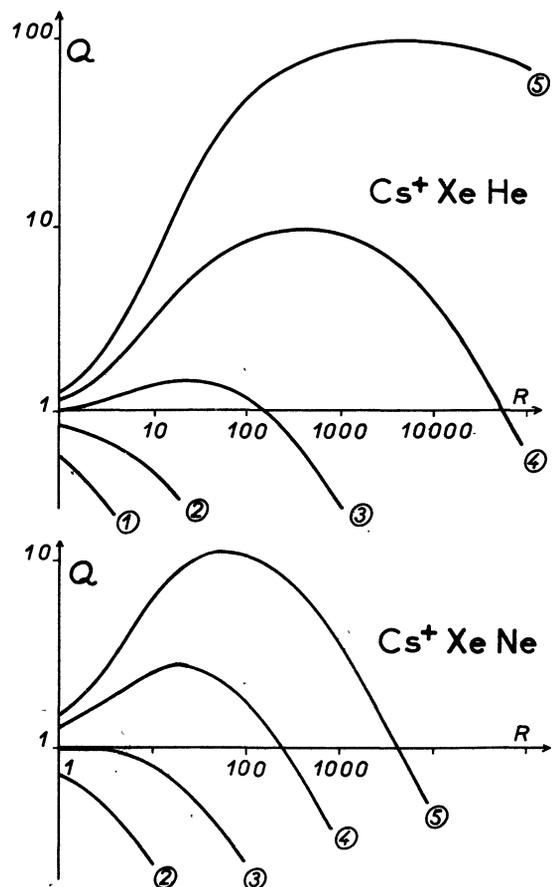


FIG. 6. — Influence de l'introduction d'un gaz tampon sur le temps de confinement d'un ion soumis également à des chocs avec un gaz résiduel lourd. Les figures représentent le facteur d'amélioration Q pour les deux mélanges ternaires $\text{Cs}^+ \text{-Xe-He}$ et $\text{Cs}^+ \text{-Xe-Ne}$, et pour les valeurs suivantes de u_0 : 200 m/s (courbes 1), 400 m/s (courbes 2), 600 m/s (courbes 3), 800 m/s (courbes 4), 1 000 m/s (courbes 5).

indique quelle amélioration apporte sur la durée de confinement l'introduction d'un gaz tampon.

Les résultats numériques ont été représentés dans la figure 6. Nous remarquons que si u_0 est inférieure à $3\sigma_1$, il ne peut y avoir amélioration du temps de confinement. Par contre si u_0 est supérieure à $3\sigma_1$, l'introduction d'un gaz léger peut améliorer sensiblement la durée de vie des ions. Ce phénomène a été effectivement observé expérimentalement [10, 11]. La figure 7, extraite de la référence [10], montre comment évolue expérimentalement la durée de vie d'atomes de Tl^+ en présence d'hélium.

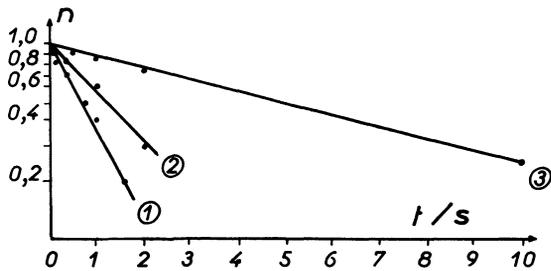


FIG. 7. — Etude expérimentale du taux de décroissance : $n(t)$ d'une population d'ions Tl^+ , d'après la référence [10]. La courbe 1 représente $n(t)$ en l'absence de gaz tampon; la courbe 2 représente $n(t)$ pour une pression partielle d'hélium de : 2×10^{-5} torr; la courbe 3 représente $n(t)$ pour une pression partielle d'hélium de : 10^{-4} torr.

5. Conclusion. — Les équations qui ont été établies dans le paragraphe 3, décrivent le comportement d'ions en présence de chocs élastiques dans un modèle simplifié. Toutefois, le paragraphe 4 montre que les résultats théoriques obtenus sont en accord avec les résultats expérimentaux, et indique ainsi que le modèle étudié peut aider à certaines prises de décisions rationnelles.

Ces équations sont immédiatement généralisables au modèle tridimensionnel, mais leur résolution numérique n'est pas simple et les méthodes utilisables feront l'objet d'une publication ultérieure. Enfin, ces équations convenablement modifiées permettent de décrire l'évolution d'une population d'ions soumise à d'autres types d'interactions binaires et de très courtes durées (par exemple les interactions produisant des phénomènes d'échange de charge).

L'utilisation de processus de Markov et des équations spécifiques qui s'en déduisent est donc très bien adaptée à la description de l'évolution d'une population diluée d'ions confinés par un champ quadrupolaire.

Remerciements. — L'auteur exprime ses très vifs remerciements à M. le Professeur M. Cadilhac, pour l'aide qu'il lui a fournie lors de fructueuses discussions scientifiques.

Appendice A : Validité des hypothèses faites. — **HYPOTHÈSE CONCERNANT LA RARETÉ DES CHOCS.** — C'est l'hypothèse fondamentale concernant la rareté

des chocs qui permet d'obtenir l'expression des probabilités de transition sous la forme exprimée dans l'ensemble des eq. (7), (8), (9), et qui est donc à la base de toute équation établie dans le paragraphe 3. Appelons P_{ex} (resp. P_{est}), la probabilité exacte calculée d'après la référence [8] (resp. estimée dans l'article) pour qu'il y ait au moins un choc durant T_s .

Nous estimons l'erreur commise en prenant la valeur de u correspondant au cas le plus défavorable, soit u_0 , et en cherchant un ordre de grandeur de l'expression :

$$\varepsilon_s = \frac{|P_{ex}(u_0) - P_{est}(u_0)|}{P_{est}(u_0)}$$

Le calcul numérique effectué dans des conditions fréquentes d'utilisation ($u_0 \sim 1\,000$ m/s, $s \sim 10^{-14}$ cm², $T_s \sim 5 \times 10^{-5}$ s, $T_m \simeq 5 \times 10^{-6}$ s), montre que l'erreur relative sur les probabilités de transitions ne dépasse pas l'ordre des 1% tant que la pression des gaz reste inférieure à 10^{-4} mm de mercure, ce qui est très acceptable.

HYPOTHÈSE CONCERNANT L'ÉQUIPARTITION DE LA PHASE. — La formule (3) montre qu'il est équivalent pour le problème étudié d'effectuer une translation sur l'axe des temps d'amplitude T_m , ou d'effectuer une translation d'amplitude $\left(-2\pi\frac{\omega}{\Omega}\right)$ sur la phase φ (modulo 2π). Le mécanisme de création des ions est périodique, de période T_m (c'est la période du champ de radio-fréquence). Enfin, l'ion ne vieillit pas sur un état puisque les chocs se produisent de façon purement accidentelle. Dans l'hypothèse où les chocs sont rares, un ion qui se trouve sur un état $|u\rangle$ à l'instant t_n peut y être depuis l'instant $(t_n - t)$ avec une probabilité d'autant plus faible que t est grand, mais décroissant lentement avec t .

Il semble raisonnable de supposer qu'il existe certains chemins privilégiés qui font passer l'ion d'un état $|v\rangle$ au moment de sa création, sur l'état $|u\rangle$ à l'instant de l'observation, d'où l'existence de certaines valeurs privilégiées de la phase φ . Supposons qu'un ion mis sur l'état $|u\rangle$ à un instant appartenant à l'intervalle de temps (t_{n-1}, t_n) ait une phase dont la fonction de distribution est la fonction $g(\varphi)$ à l'instant t_n . Dans la population d'ions se trouvant sur l'état $|u\rangle$ à cet instant cohabitent : une sous-population d'ions amenée pendant l'intervalle de temps (t_{n-1}, t_n) et dont la fonction de distribution vaut

$$g_1(\varphi) = g(\varphi),$$

une sous-population d'ions amenée pendant l'intervalle de temps (t_{n-2}, t_{n-1}) et dont la fonction de distribution vaut

$$g_2(\varphi) = g\left(\varphi + \frac{2\pi\omega}{\Omega}\right),$$

et ainsi de suite, l'importance des diverses sous-populations décroissant de façon exponentielle mais assez lentement. La superposition de toutes les sous-

populations conduit alors à une loi de probabilité de la phase aléatoire $\Phi(t)$ qui est sensiblement équirépartie à chaque instant (voir Fig. 8). Cette équirépartition est d'autant mieux réalisée que les chocs sont plus rares.

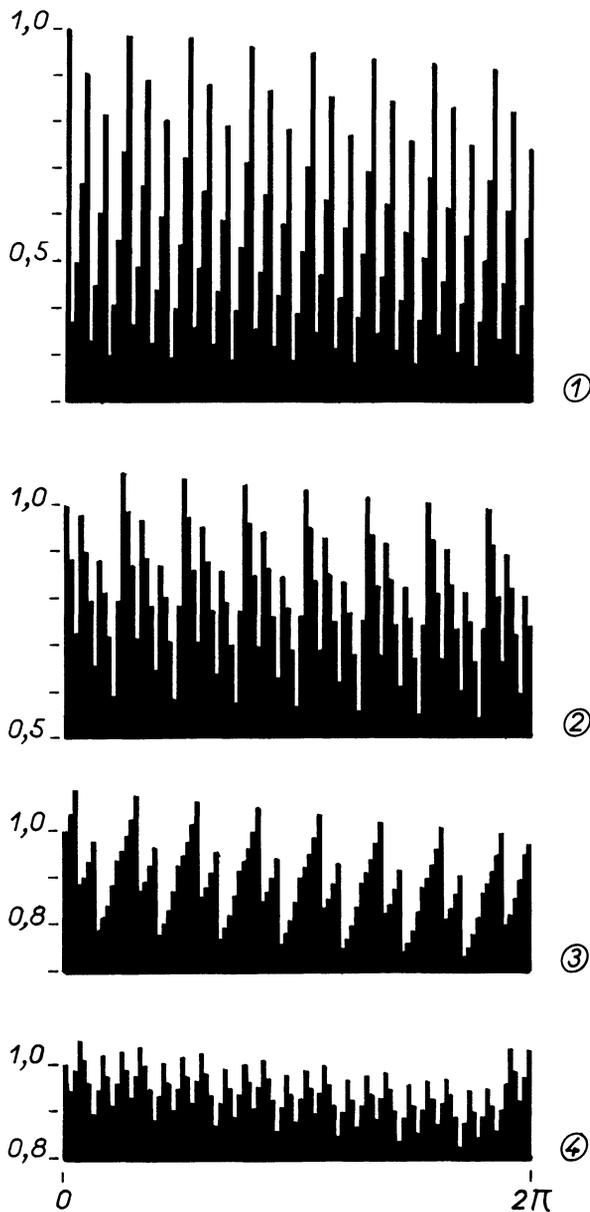


FIG. 8. — Influence de la dispersion de $g(\varphi)$ sur la loi de Φ . Les diagrammes correspondent au cas limite suivant : $T_m = 0,13 T_s$, intervalle de temps moyen entre deux chocs de l'ordre de $10 T_s$. On prend pour $g(\varphi)$ une fonction porte dont la largeur varie : $2\pi/100$ (diagramme 1), $6\pi/100$ (diagramme 2), $10\pi/100$ (diagramme 3), $22\pi/100$ (diagramme 4).

Appendice B : Approche thermodynamique de la loi de répartition des ions. — Quoique l'hamiltonien dépende du temps, le fait que nous puissions exhiber certaines constantes du mouvement liées à la vitesse montre qu'il doit exister certaines caractéristiques énergétiques qui restent invariantes lors du mouvement. Si on suppose :

$$\Omega \gg \omega$$

et si on calcule la valeur moyenne (calculée sur une période T_m) des quantités position et vitesse, soit :

$$\bar{x}_1(t) = \frac{u}{\omega} \cos(\omega t - \varphi)$$

$$\bar{\dot{x}}_1(t) = -u \sin(\omega t - \varphi)$$

on obtient la même loi du mouvement que celle que l'on obtiendrait si l'ion était piégé dans un puits de potentiel harmonique [3]. C'est l'existence d'un tel pseudo-potentiel qui permet une approche thermodynamique. Il est en effet aisé de montrer que le mouvement moyen d'un ion sur l'état $|u\rangle$ correspond à une pseudo-énergie totale :

$$E_T = \frac{1}{2} m_1 u^2. \quad (31)$$

En recherchant la loi de distribution de E_T qui rend l'entropie maximum, sachant que la température du thermostat est T_2 (gaz fournissant les collisions) et que la valeur moyenne de E_T est kT_2 , nous trouvons l'expression classique de la densité de probabilité de la pseudo-énergie, et l'expression (31) permet alors de calculer la densité de probabilité concernant l'état aléatoire $|U\rangle$, dont l'expression est donnée par la formule (28).

L'existence d'une telle approche permet d'induire des résultats qui doivent être ensuite vérifiés par des méthodes, plus cinétiques. Elle permet également d'obtenir des solutions approchées qui peuvent servir de point de départ pour des méthodes numériques.

Bibliographie

- [1] PAUL, W., REINHARD, H. P., VON ZAHN, U., *Z. Phys.* **155** (1958) 143.
- [2] FISCHER, E., *Z. Phys.* **156** (1959) 26.
- [3] DEHMELT, H. G., *Adv. At. Mol. Phys.* **3** (1967) 53 et **5** (1969) 109.
- [4] BURNHAM, D. C., Doctoral Thesis, Harvard University (1966).
- [5] MAJOR, F. G., DEHMELT, H. G., *Phys. Rev.* **170** (1968) 91.
- [6] CHURCH, D. A., DEHMELT, H. G., *J. Appl. Phys.* **40** (1969) 3421.
- [7] ANDRÉ, J., SCHERMANN, J. P., *Phys. Lett. A* **45** (1973) 139.
- [8] ANDRÉ, J., VEDEL, F., *Physica c* **81** (1976) 376.
- [9] DEHMELT, H. G., WALLS, F. L., *Phys. Rev. Lett.* **21** (1968) 127.
- [10] SCHERMANN, J. P., MAJOR, F. G., Heavy ion plasma confinement in a R.F. quadrupole trap (Goddard Space Flight Center), 1971.
- [11] FISK, G., *J. Chem. Phys.* **47** (1967) 2649.
- [12] DAWSON, P. H., WHETTEN, N. R., *Naturwissenschaften* **56** (1969) 109.