

*Développement de méthodes asymptotiques
pour l'étude des interactions entre atomes
froids*

*Détermination de longueurs de diffusion
du sodium et du césium*

Benoît T'JAMPENS

Laboratoire Aimé Cotton

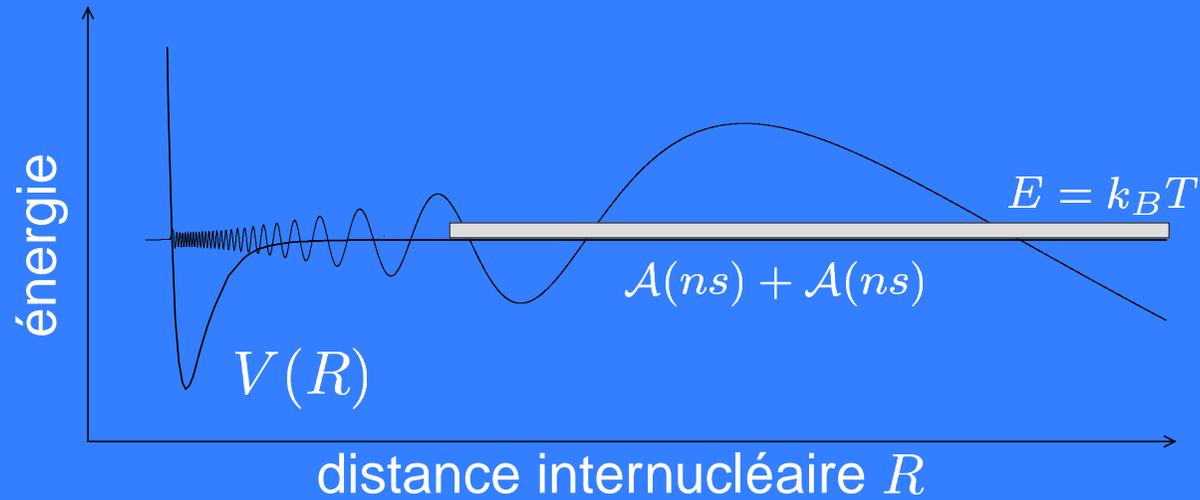


Plan de l'exposé

1. **Introduction aux méthodes asymptotiques**
 - Collision élastique binaire et longueur de diffusion
 - Zone interne et zone asymptotique
 - Nœuds de l'onde s à énergie nulle et longueur de diffusion
2. **Méthode asymptotique à une voie et longueur de diffusion triplet du césium**
 - Photoassociation d'atomes froids de césium et minima d'intensité
 - Résultats et discussions
3. **Méthode asymptotique à plusieurs voies couplées et longueurs de diffusion du sodium**
4. **Conclusion et perspectives**

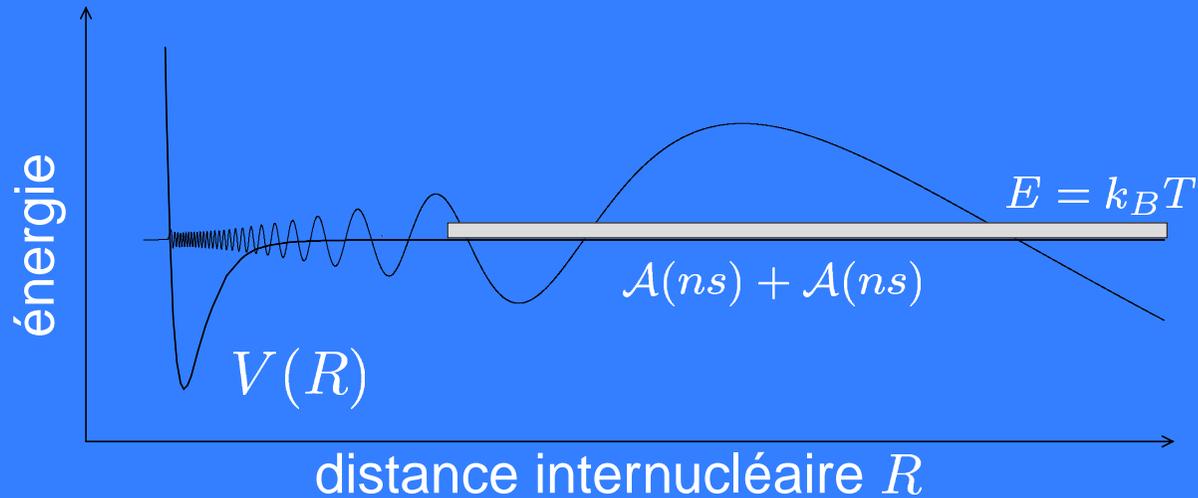


Collision élastique binaire



- Système : deux atomes alcalins \mathcal{A} identiques

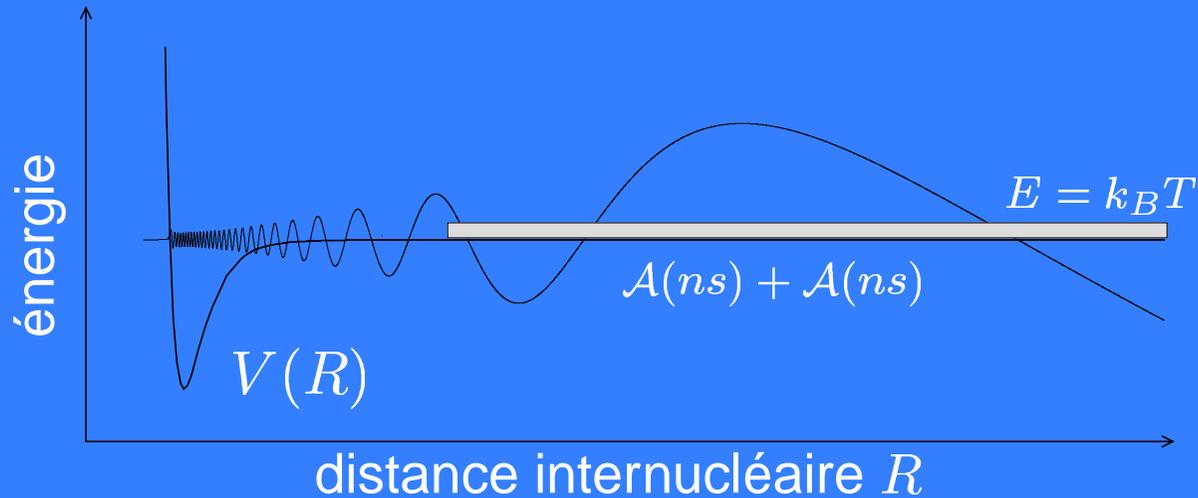
Collision élastique binaire



- Système : **deux** atomes alcalins \mathcal{A} **identiques**
- Potentiel central - déphasages :

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \psi_{kl}^{coll}(R)}{dR^2} + \left(\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu R^2} + V(R) - E \right) \psi_{kl}^{coll}(R) = 0$$

Collision élastique binaire

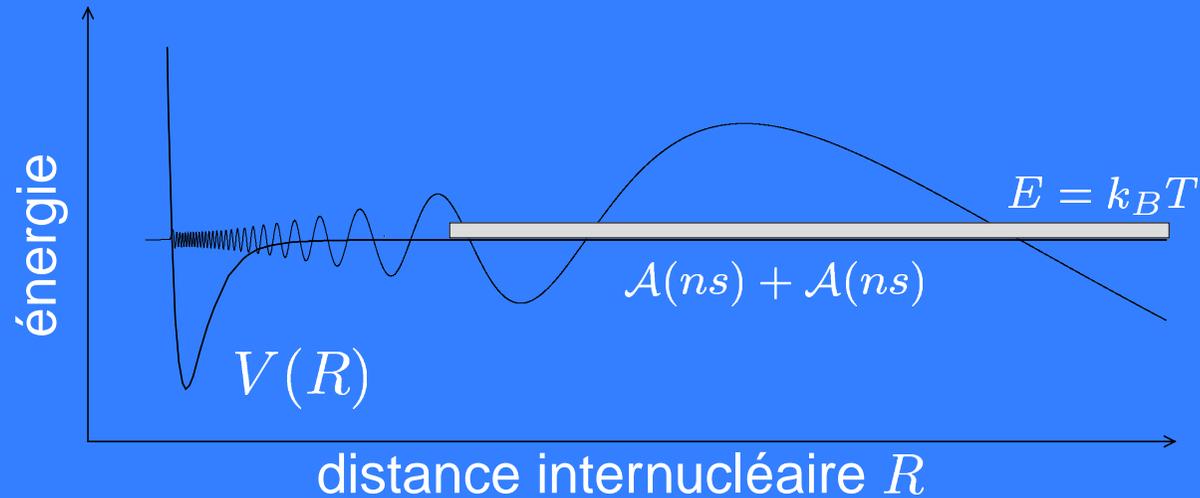


- Système : **deux** atomes alcalins \mathcal{A} **identiques**
- Potentiel central - déphasages :

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \psi_{k\ell}^{coll}(R)}{dR^2} + \left(\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu R^2} - E \right) \psi_{k\ell}^{coll}(R) = 0$$

$$\psi_{k\ell}^{coll}(R) \underset{R \rightarrow \infty}{\sim} C \sin \left(kR - \ell \frac{\pi}{2} \right)$$

Collision élastique binaire



- Système : **deux** atomes alcalins \mathcal{A} **identiques**
- Potentiel central - déphasages :

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \psi_{k\ell}^{coll}(R)}{dR^2} + \left(\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu R^2} + V(R) - E \right) \psi_{k\ell}^{coll}(R) = 0$$

$$\psi_{k\ell}^{coll}(R) \underset{R \rightarrow \infty}{\sim} C \sin \left(kR - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_\ell(k) \right)$$

Limite des très basses énergies

- $\ell \neq 0$: barrière centrifuge \Rightarrow onde s ($\ell = 0$)

$$\psi_{k0}^{coll}(R) \underset{R \rightarrow \infty}{\sim} C \sin(kR + \delta_0(k))$$

$$\psi_{00}^{coll}(R) \underset{\substack{R \rightarrow \infty \\ k \rightarrow 0}}{\sim} C'(r - a)$$

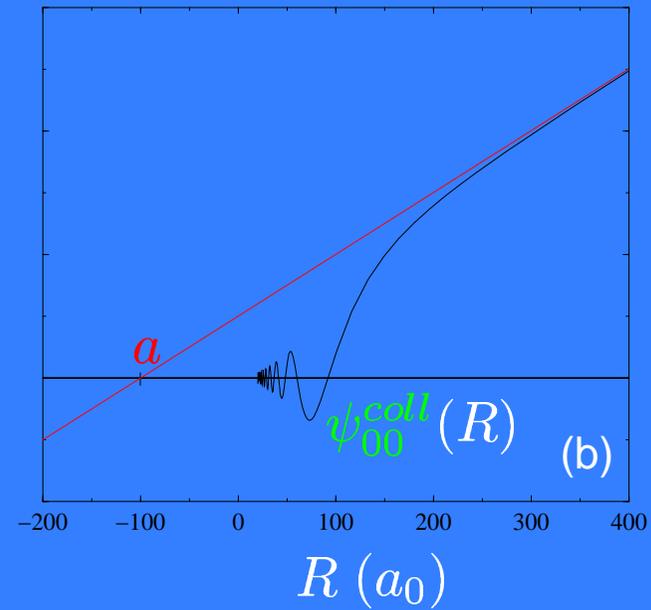
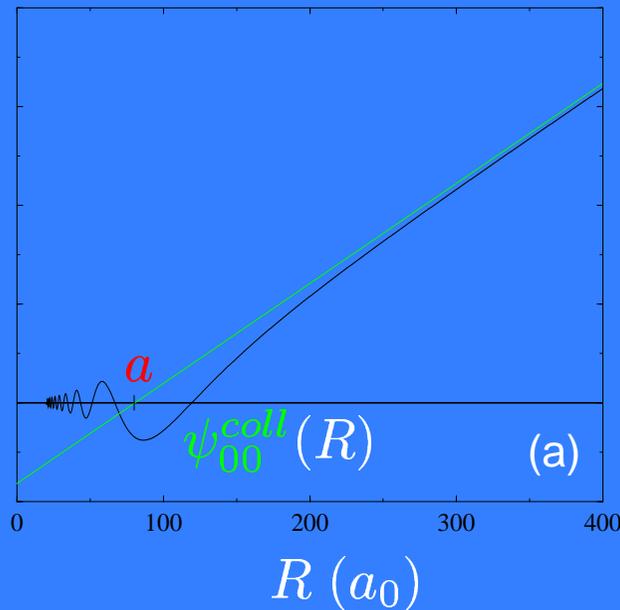
Limite des très basses énergies

- $\ell \neq 0$: barrière centrifuge \Rightarrow onde s ($\ell = 0$)

$$\psi_{k0}^{coll}(R) \underset{R \rightarrow \infty}{\sim} C \sin(kR + \delta_0(k))$$

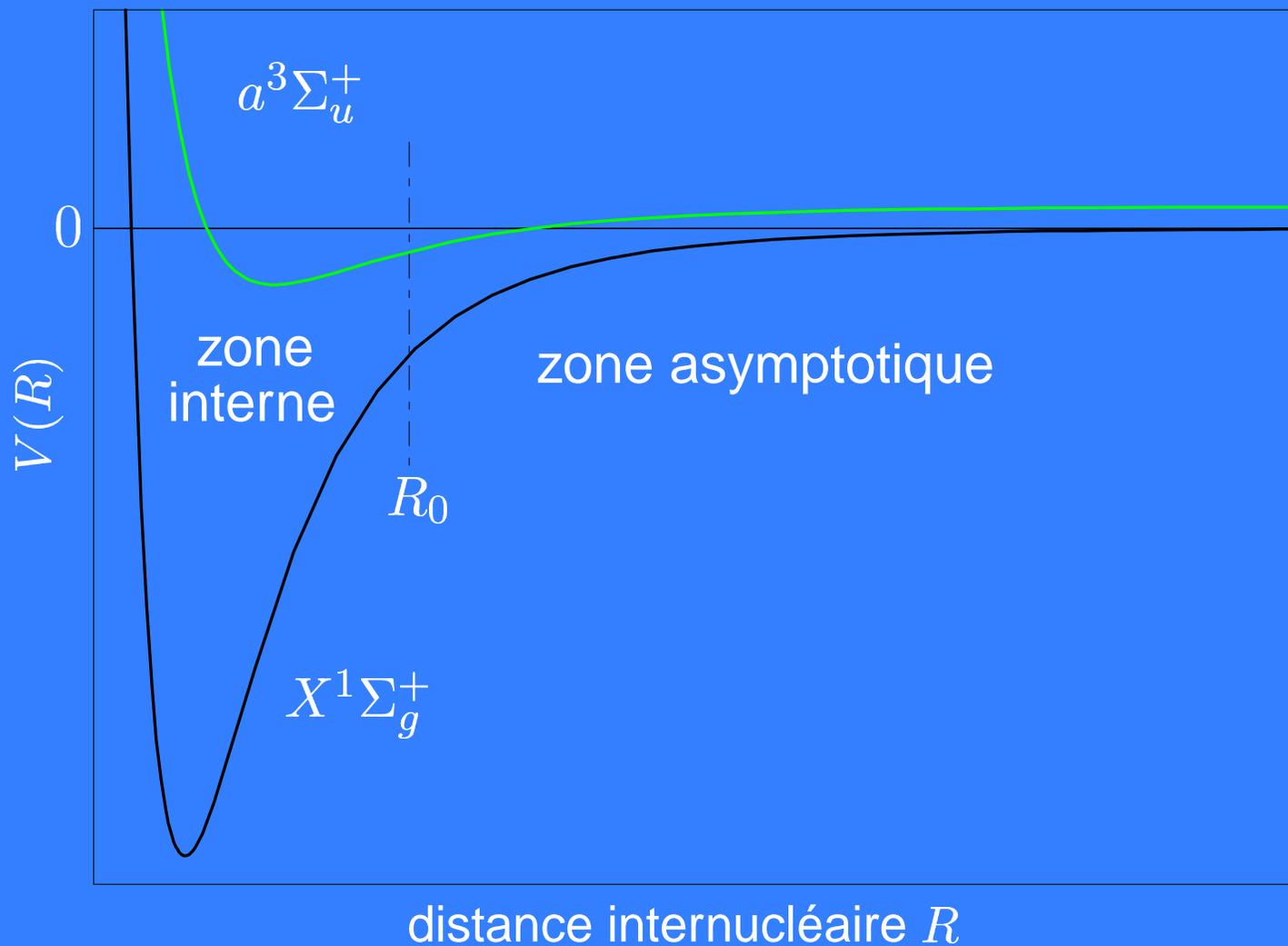
$$\psi_{00}^{coll}(R) \underset{\substack{R \rightarrow \infty \\ k \rightarrow 0}}{\sim} C'(r - a)$$

$$a = \lim_{k \rightarrow 0} -\frac{\delta_0(k)}{k} : \text{longueur de diffusion}$$



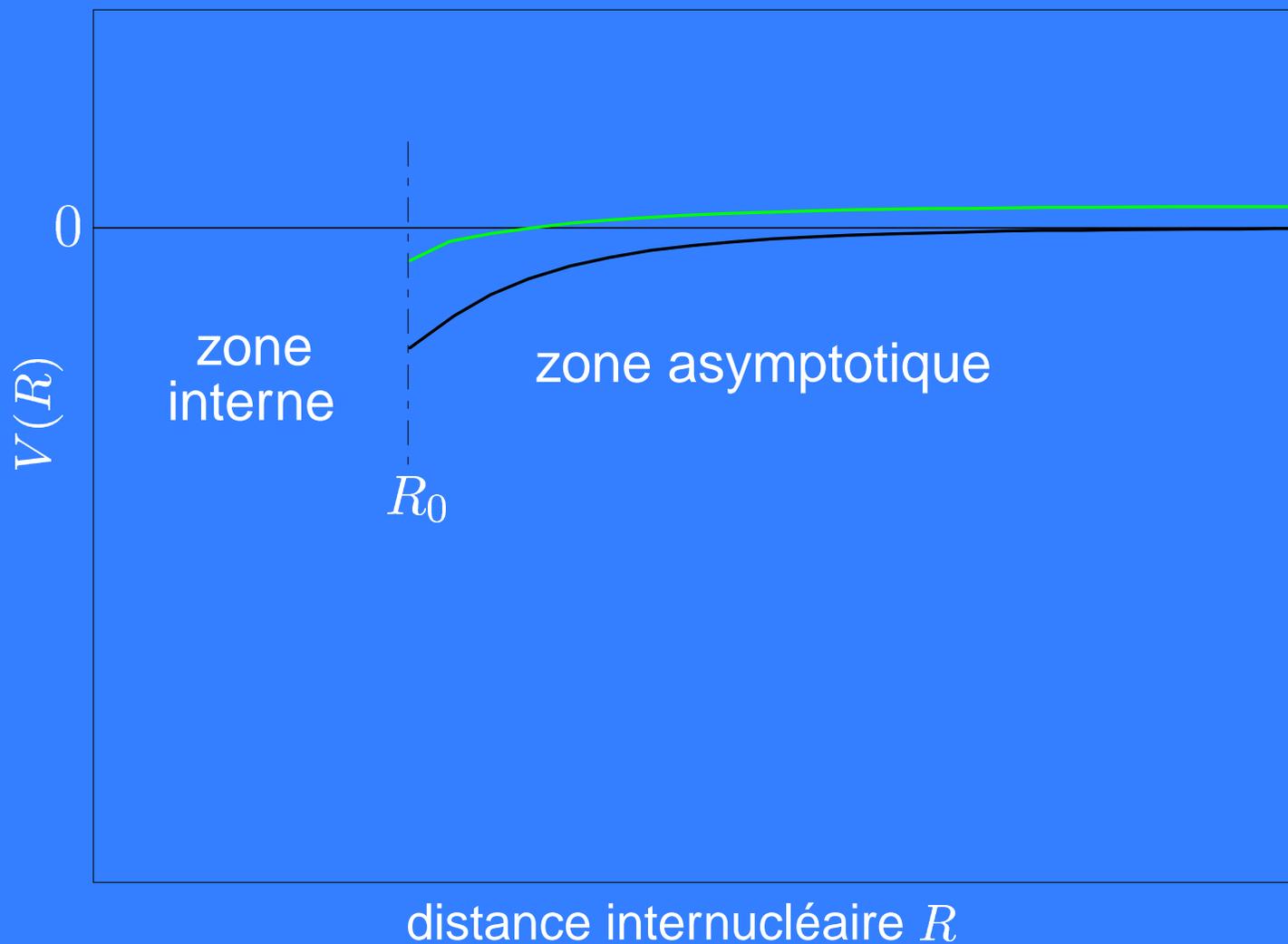
Zone interne et zone asymptotique

- Zone interne : une molécule diatomique
- Zone asymptotique : deux atomes alcalins en interaction



Zone interne et zone asymptotique

- Zone interne : une molécule diatomique
- Zone asymptotique : deux atomes alcalins en interaction



Nœuds de l'onde s au seuil : $E = 0$, $\ell = 0$

- Intégration numérique dans la partie asymptotique du potentiel du fondamental à partir de $R = \infty$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dR^2} + V_{as}(R) \right) \psi_{00}^{coll}(R) = 0$$



Nœuds de l'onde s au seuil : $E = 0, \ell = 0$

- Intégration numérique dans la partie **asymptotique** du potentiel du fondamental à partir de $R = \infty$:

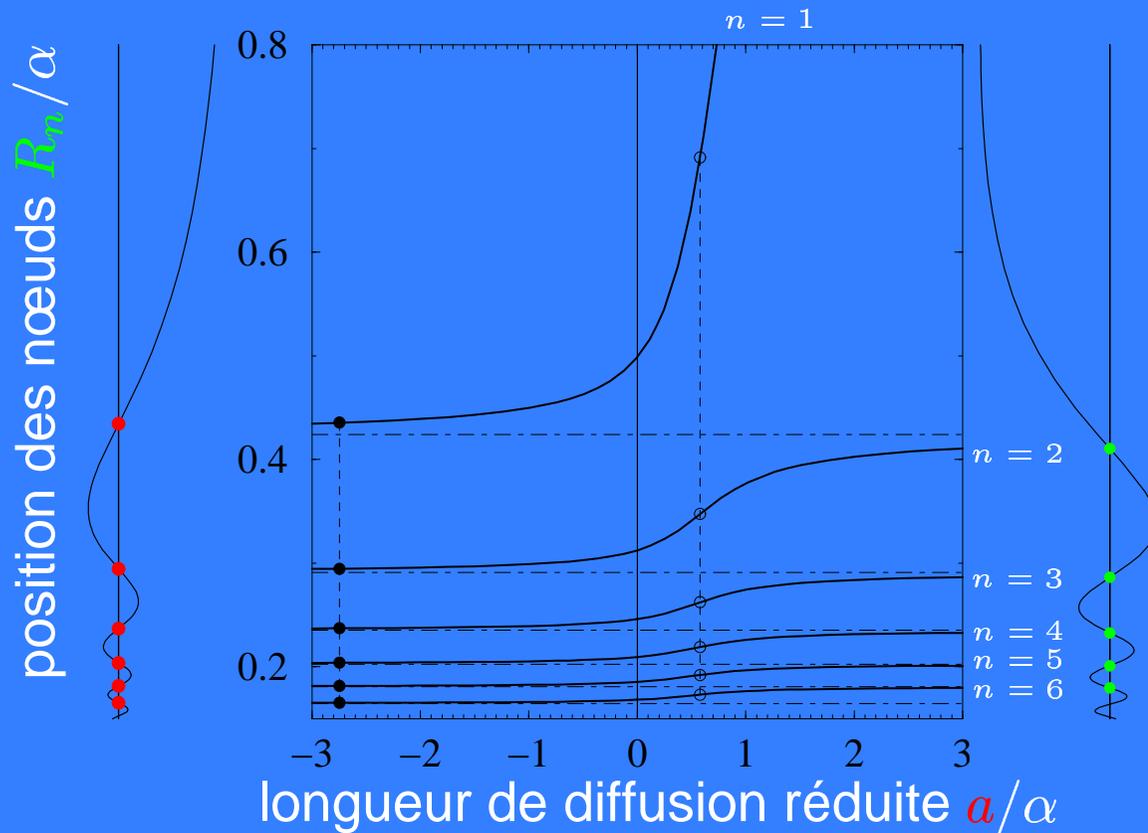
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dR^2} + V_{as}(R) \right) \psi_{00}^{coll}(R) = 0$$

$$R > R_0 : V_{as}(R) = \underbrace{-\frac{C_6}{R^6} - \frac{C_8}{R^8} - \frac{C_{10}}{R^{10}}}_{\text{interactions électrostatiques}} \pm \underbrace{\mathcal{D}R^\gamma e^{-2\beta R}}_{\text{échange asymptotique}}$$

- Condition initiale ($R = \infty$) : $\psi_{00}^{coll}(R) = (R - a)$

Nœuds de l'onde s au seuil : $E = 0, \ell = 0$

- Pour $E = 0$, longueur de diffusion $a \longleftrightarrow$ positions des nœuds R_n de l'onde s $\psi_{00}^{coll}(R)$



$$\alpha = \left(\frac{2\mu C_6}{\hbar^2} \right)^{1/4}$$

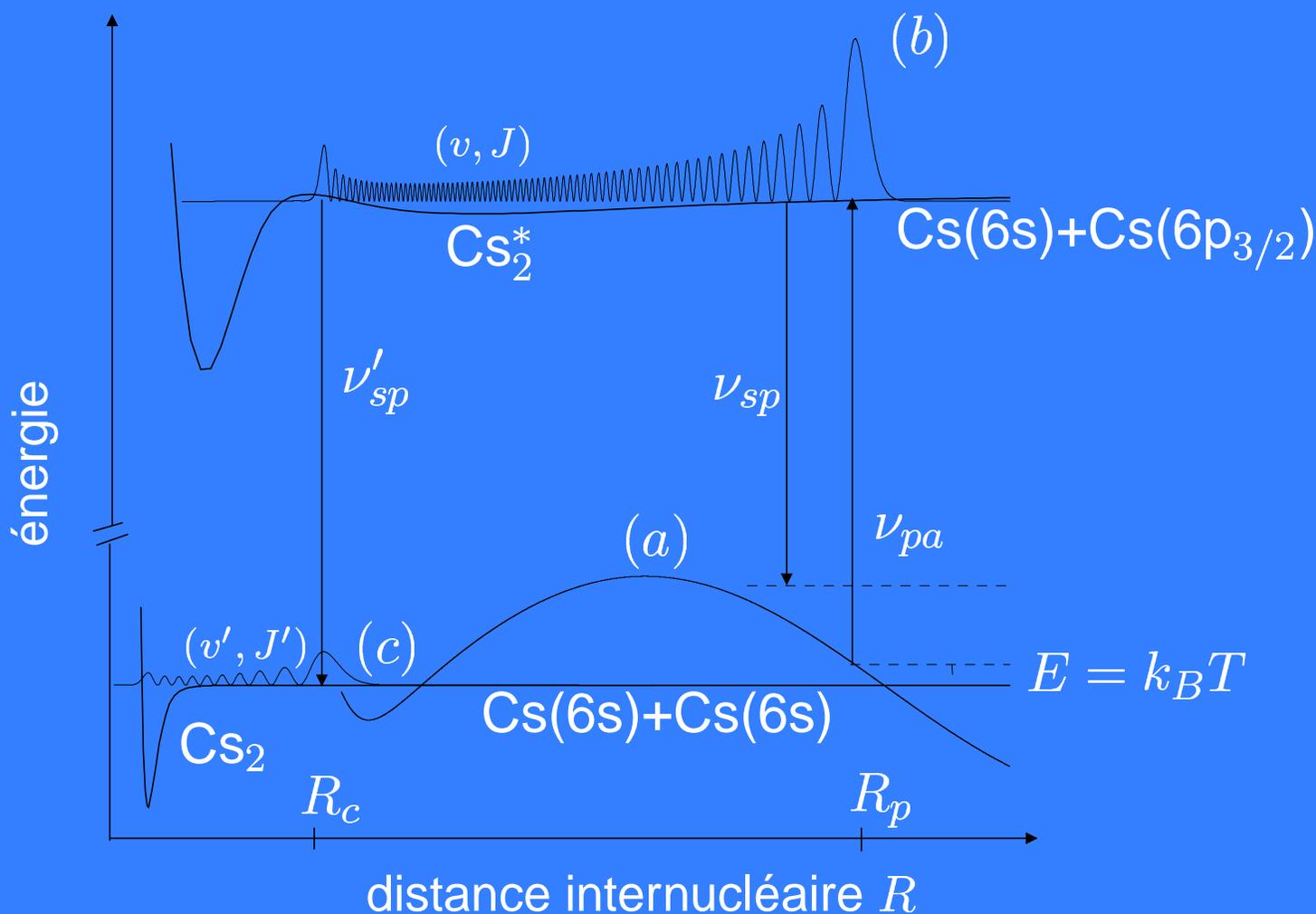
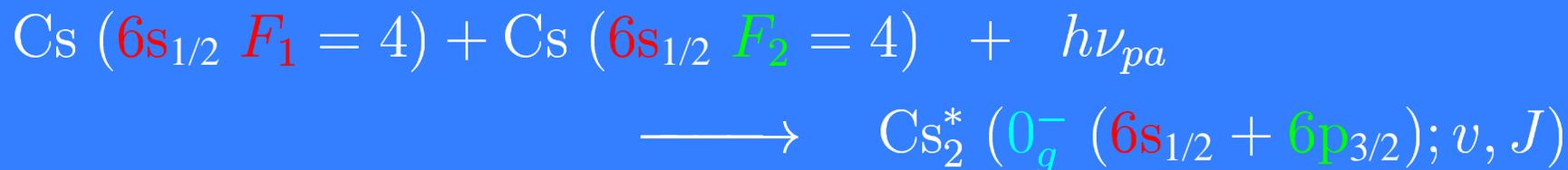
(facteur d'échelle)

Plan de l'exposé

1. Introduction aux méthodes asymptotiques
 - Collision élastique binaire et longueur de diffusion
 - Zone interne et zone asymptotique
 - Nœuds de l'onde s à énergie nulle et longueur de diffusion
2. Méthode asymptotique à une voie et longueur de diffusion triplet du césium
 - Photoassociation d'atomes froids de césium et minima d'intensité
 - Résultats et discussions
3. Méthode asymptotique à plusieurs voies couplées et longueurs de diffusion du sodium
4. Conclusion et perspectives

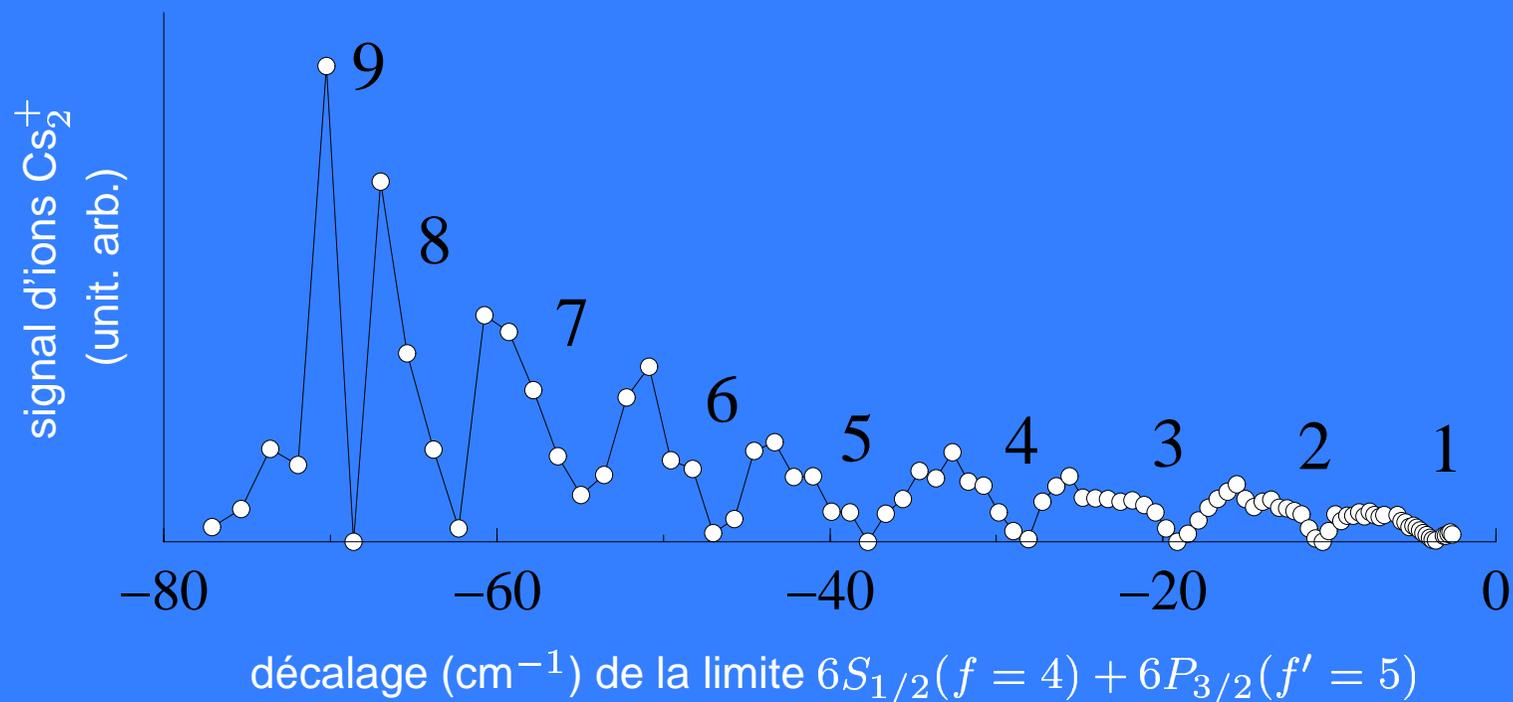


Photoassociation d'atomes froids de césium



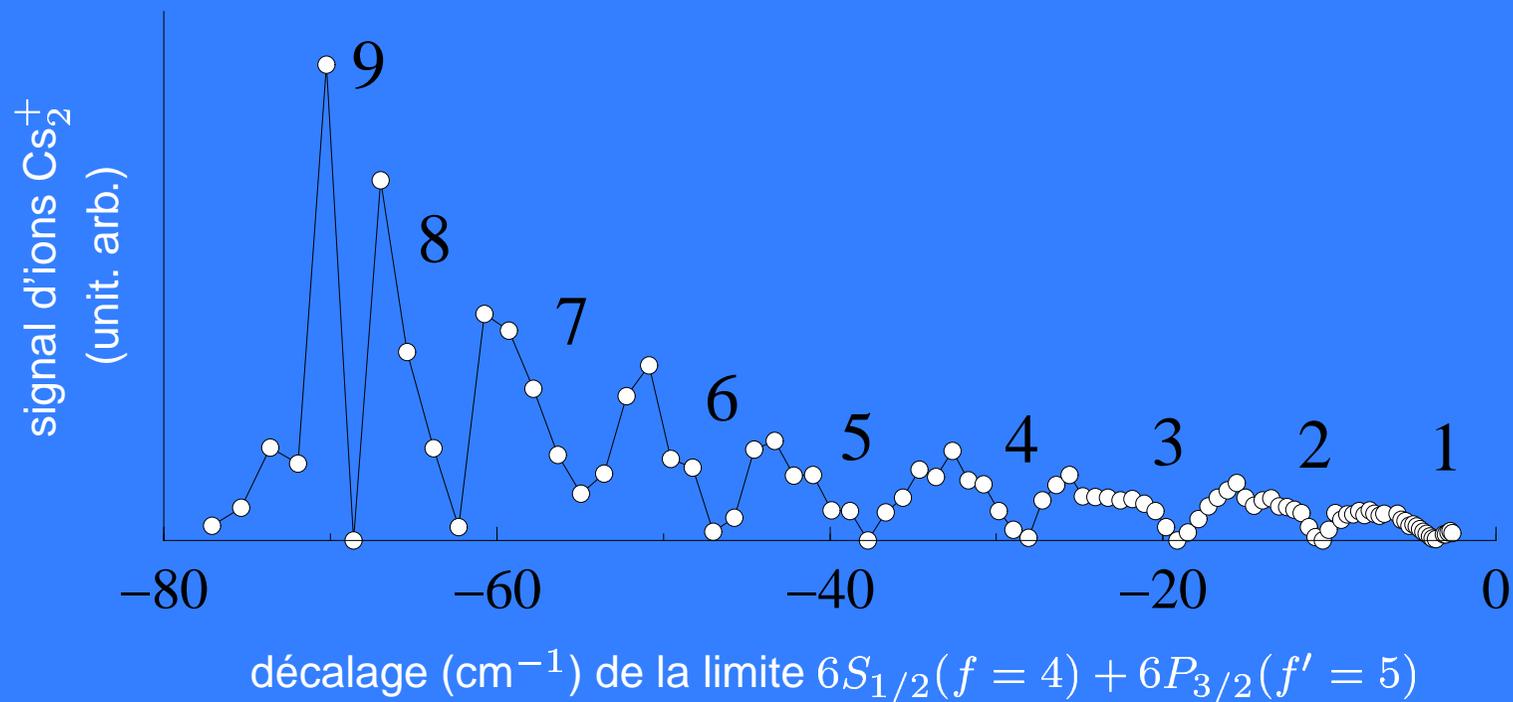
Spectre de photoassociation

- atomes polarisés, $f = 4$, $M_f = 4 \rightarrow$ une seule voie ($a^3\Sigma_u^+$)



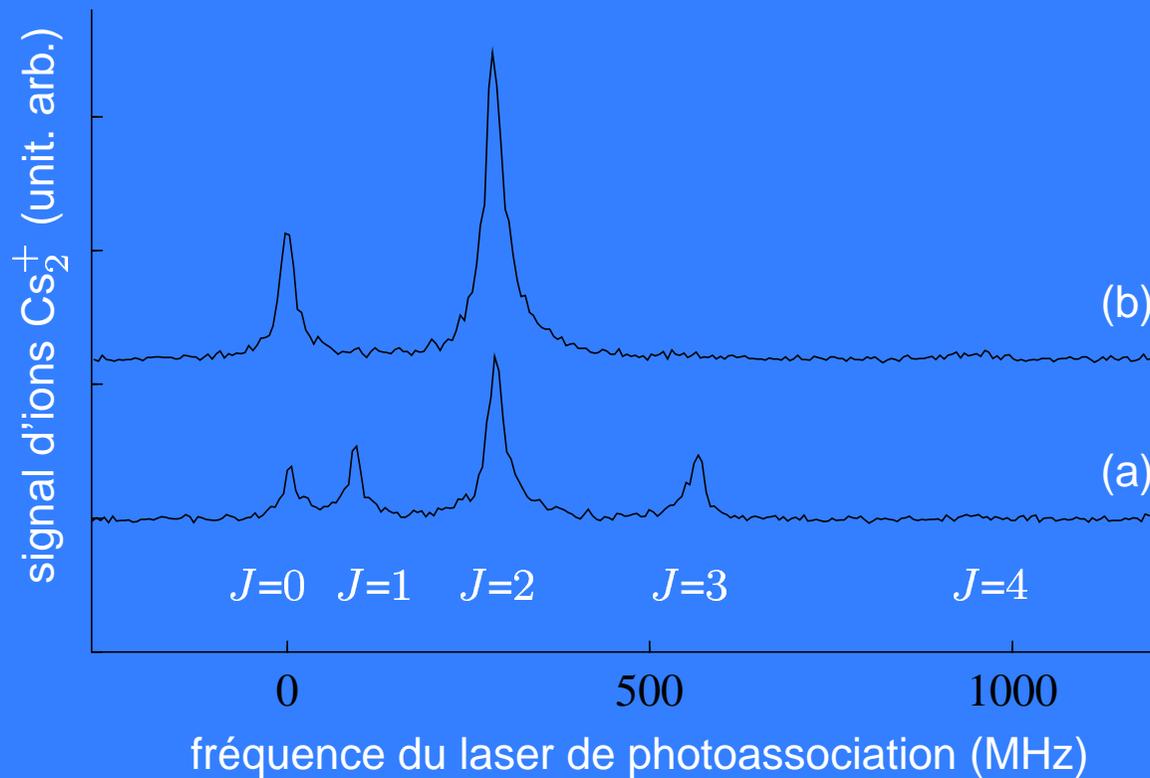
Spectre de photoassociation

- atomes polarisés, $f = 4$, $M_f = 4 \rightarrow$ une seule voie ($a^3\Sigma_u^+$)
- Modulation des intensités des raies de photoassociation \Rightarrow **minima** d'intensité

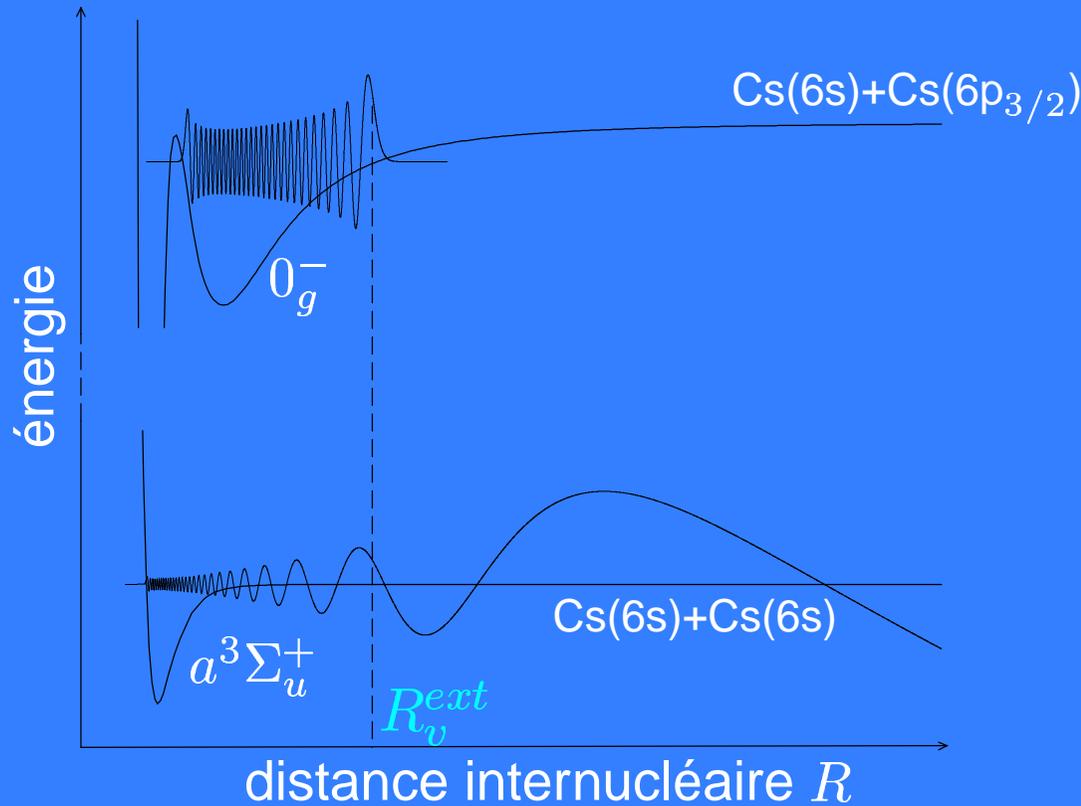


Spectre de photoassociation

- atomes polarisés, $f = 4$, $M_f = 4 \rightarrow$ une seule voie ($a^3\Sigma_u^+$)
- structure rotationnelle ($J = \ell, \ell \pm 2$)

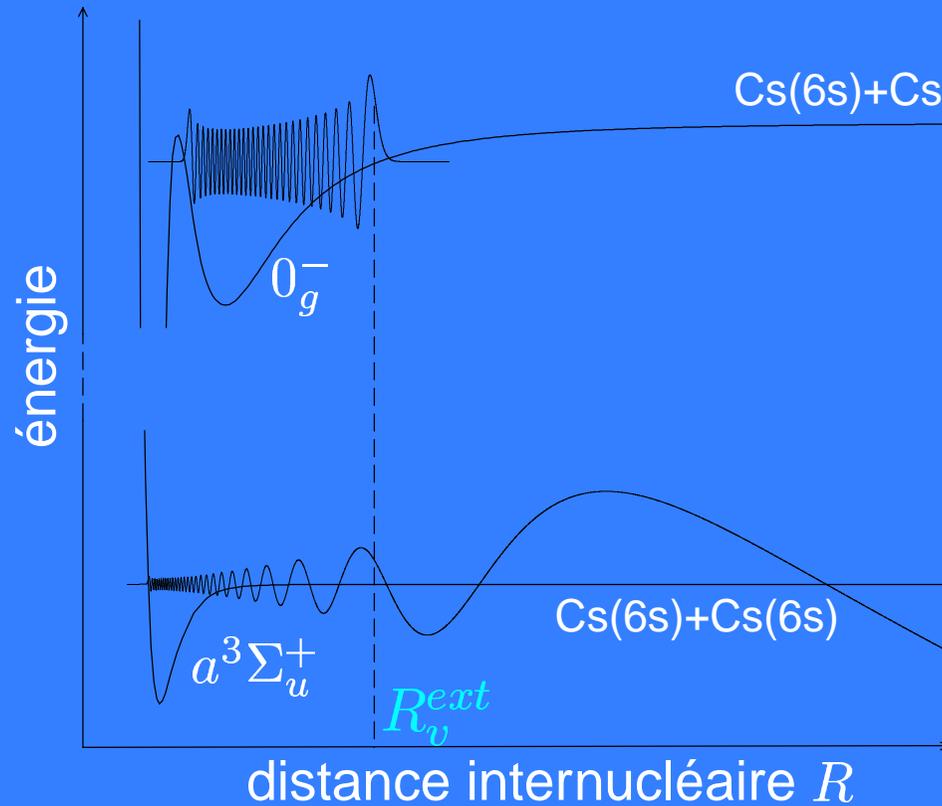


Raisonnement qualitatif : approximation δ



$$\gamma_{pa} \propto \left| \underbrace{\int_0^{\infty} \psi_i^{coll}(R) \mu(R) \phi_f^{mol}(R) dR}_{\mathcal{R}} \right|^2$$

Raisonnement qualitatif : approximation δ

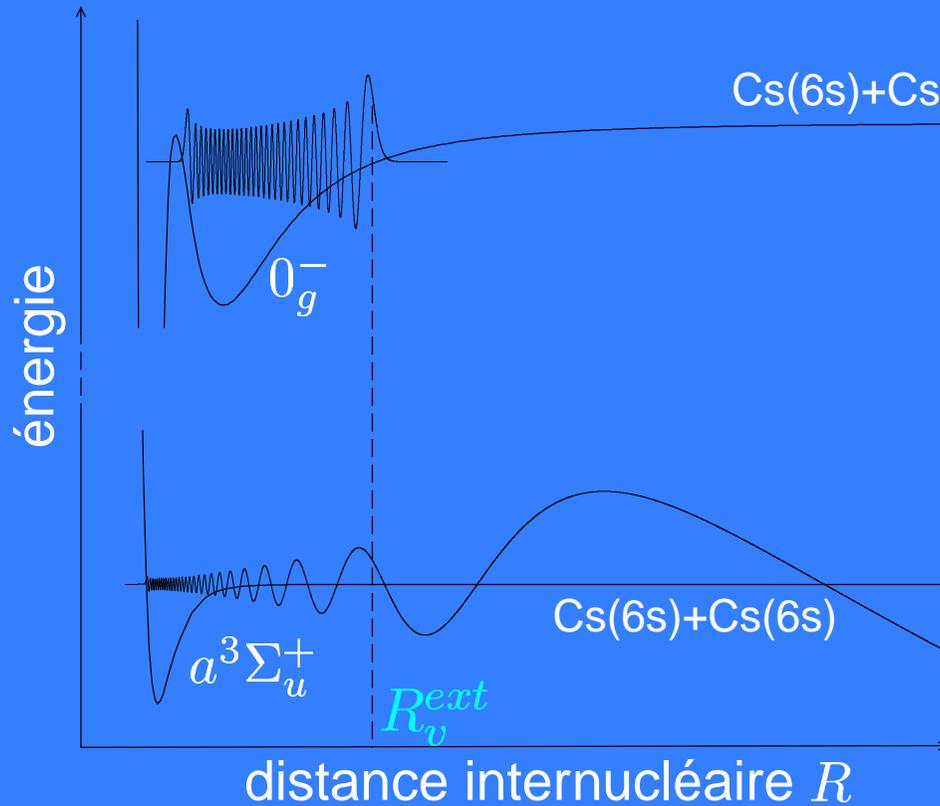


$$\mu(R) \approx D^{at}$$

$$\phi_f^{mol}(R) = \delta(R - R_v^{ext})$$

$$\gamma_{pa} \propto \left| \underbrace{\int_0^\infty \psi_i^{coll}(R) \mu(R) \phi_f^{mol}(R) dR}_{\mathcal{R}} \right|^2$$

Raisonnement qualitatif : approximation δ



$$\mu(R) \approx D^{at}$$

$$\phi_f^{mol}(R) = \delta(R - R_v^{ext})$$

$$\gamma_{pa} \propto |\psi_i^{coll}(R_v^{ext})|^2$$

$$\gamma_{pa} \propto \left| \underbrace{\int_0^\infty \psi_i^{coll}(R) \mu(R) \phi_f^{mol}(R) dR}_{\mathcal{R}} \right|^2$$

Étude des minima d'intensité

- Fonction d'onde finale ϕ_f^{mol} \Rightarrow état lié du potentiel 0_g^-
(programme Numérov)

Analyse des progressions rovibrationnelles d'un spectre de PA

\rightsquigarrow détermination expérimentale du puits externe de l'état 0_g^-

$$\mathcal{R} = \int_0^{\infty} \psi_i^{coll}(R) \mu(R) \phi_f^{mol}(R) dR$$

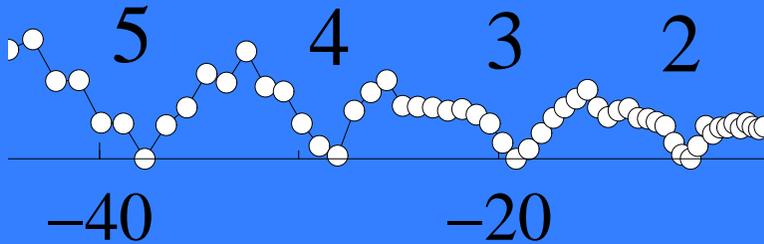
Étude des minima d'intensité

- Fonction d'onde **finale** ϕ_f^{mol} \Rightarrow état lié du potentiel 0_{g}^-
(programme Numérov)
 - Fonction d'onde **initiale** ψ_i^{coll} \Rightarrow onde s à énergie nulle
(modèle asymptotique)
- \rightsquigarrow principaux paramètres : C_6 (interaction de Van der Waals) et a

$$\mathcal{R} = \int_0^{\infty} \psi_i^{coll}(R) \mu(R) \phi_f^{mol}(R) dR$$

Étude des minima d'intensité

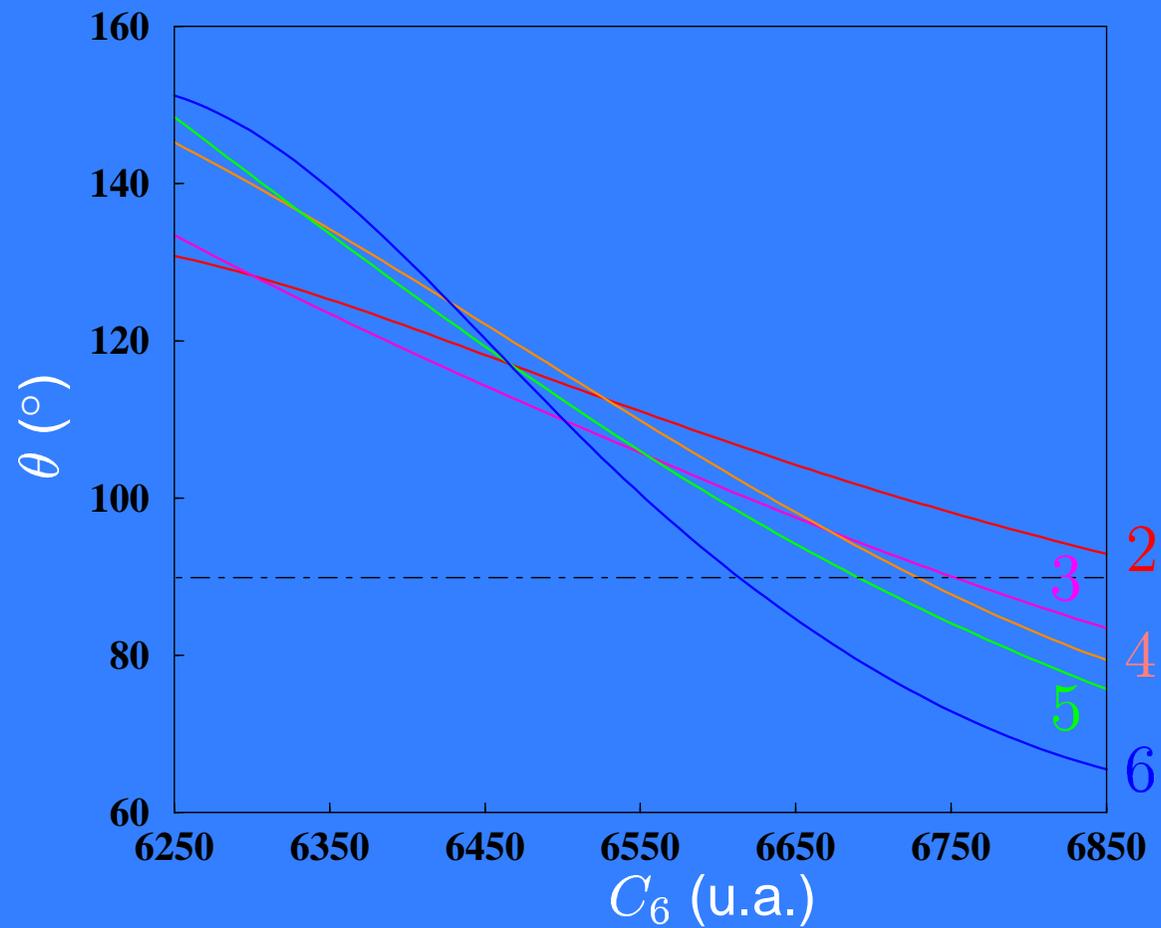
- Fonction d'onde **finale** ϕ_f^{mol} \Rightarrow état lié du potentiel 0_{g}^- (programme Numérov)
- Fonction d'onde **initiale** ψ_i^{coll} \Rightarrow onde s à énergie nulle (modèle asymptotique)



- Pour chaque position Δ_n^{exp} d'un minimum, à C_6 fixé, recherche de la valeur de a annulant le recouvrement \mathcal{R} (\Rightarrow intensité nulle)

$$\mathcal{R} = \int_0^{\infty} \psi_i^{coll}(R) \mu(R) \phi_f^{mol}(R) dR$$

Résultats et discussions



$$\tan \theta = \frac{a}{\alpha}$$



Résultats et discussions

- Compatibilité entre les différents minima : procédure de moindres carrés

$$\chi^2(C_6, a) = \sum_n \left(\frac{\Delta_n^{exp} - \Delta_n^{theor}(C_6, a)}{\sigma_n^{exp}} \right)^2$$

- Résultats (minima 2 à 6) :

$$C_6 = 6510 \pm 70 \text{ u.a.}$$

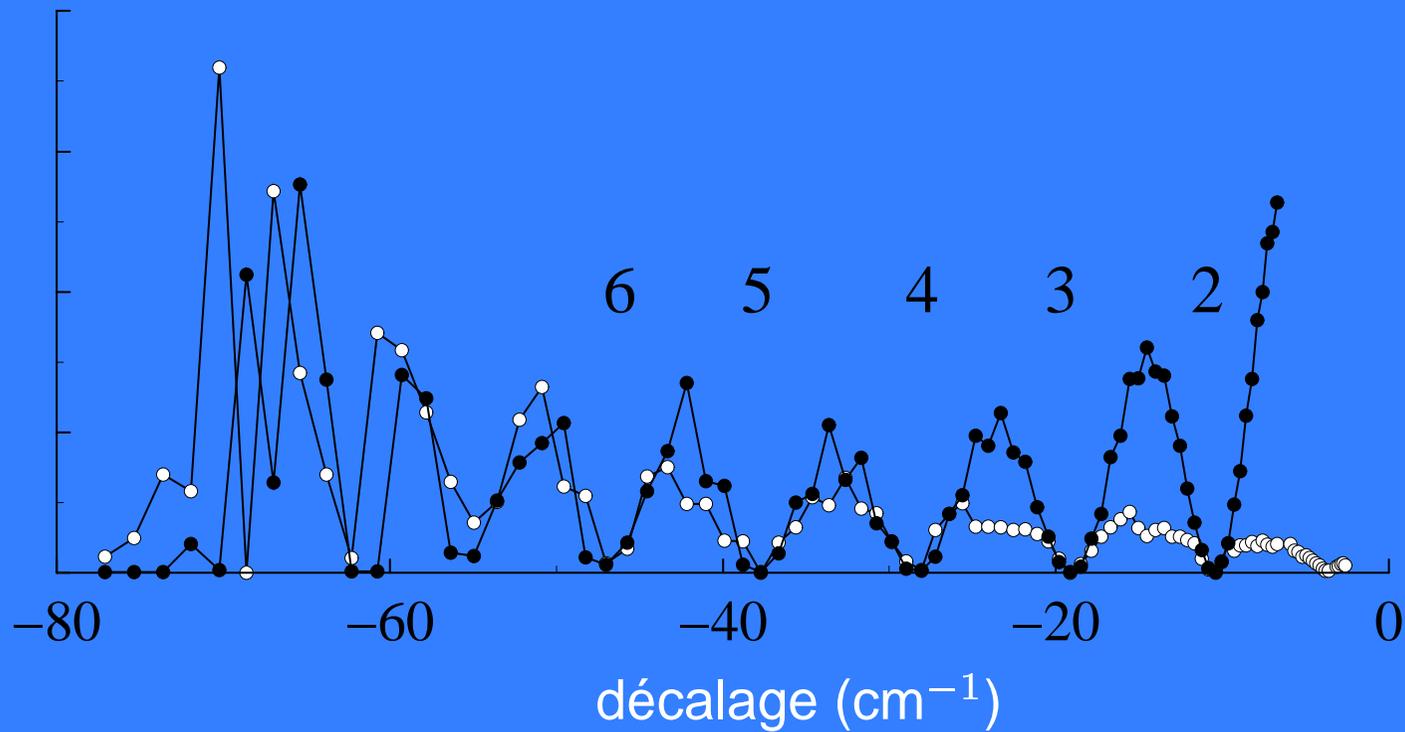
$$a = -530 \pm \frac{160}{295} a_0$$

Résultats et discussions

- Résultats (minima 2 à 6) :

$$C_6 = 6510 \pm 70 \text{ u.a.}$$

$$a = -530 \pm_{295}^{160} a_0$$



Résultats et discussions

- Résultats (minima 2 à 6) :

$$C_6 = 6510 \pm 70 \text{ u.a.}$$

$$a = -530 \pm \frac{160}{295} a_0$$

- Expérience de Stanford - Analyse du NIST

$$C_6 = 6890 \pm 35 \text{ u.a.} \quad a = 2400 \pm 25 a_0$$

Résultats et discussions

- Plusieurs analyses ont montré que $C_6 > 6800$ u.a.
- Discussion sur la méthode :
 - Paramètres du potentiel asymptotique : C_8 , C_{10} , échange



Résultats et discussions

- Plusieurs analyses ont montré que $C_6 > 6800$ u.a.
- Discussion sur la méthode :
 - Paramètres du potentiel asymptotique : C_8 , C_{10} , échange
 - Effets de champ fort

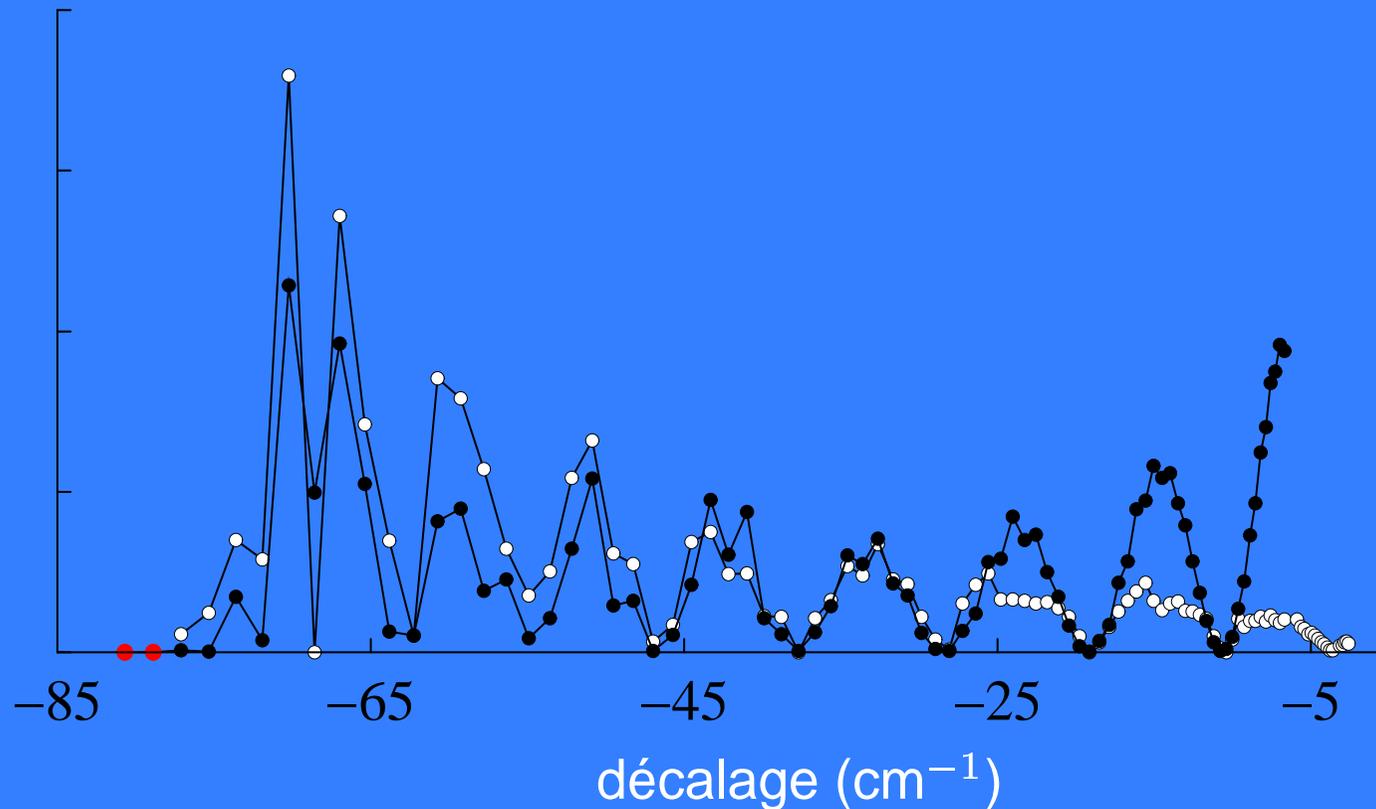


Résultats et discussions

- Plusieurs analyses ont montré que $C_6 > 6800$ u.a.
- Discussion sur la méthode :
 - Paramètres du potentiel asymptotique : C_8, C_{10} , échange
 - Effets de champ fort
 - Potentiel $0_g^- \Rightarrow$ ajout de niveaux liés

Résultats et discussions

- Plusieurs analyses ont montré que $C_6 > 6800$ u.a.
- Discussion sur la méthode :
 - Potentiel $0_g^- \Rightarrow$ ajout de **deux** niveaux liés
(PA à deux couleurs $\rightarrow C_6 = 6830$ u.a. $a = 2476 a_0$)



Plan de l'exposé

1. Introduction aux méthodes asymptotiques
 - Collision élastique binaire et longueur de diffusion
 - Zone interne et zone asymptotique
 - Nœuds de l'onde s à énergie nulle et longueur de diffusion
2. Méthode asymptotique à une voie et longueur de diffusion triplet du césium
 - Photoassociation d'atomes froids de césium et minima d'intensité
 - Résultats et discussions
3. Méthode asymptotique à plusieurs voies couplées et longueurs de diffusion du sodium
4. Conclusion et perspectives

Généralisation du modèle asymptotique

Équations couplées : (exemple de 2 voies couplées)

- fonction d'onde couplée :

$$\psi(R, \{\vec{r}_i\}) = \frac{1}{R} \sum_{\beta=1}^2 F_{\beta}(R) \phi_{\beta}(R, \{\vec{r}_i\})$$

- les **composantes radiales** $F_{\beta}(R)$ des 2 voies couplées sont solutions des 2 équations couplées :

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu R^2} + V_{\alpha}(R) - E \right) F_{\alpha}(R) = \\ & = \sum_{\beta=1}^2 \left(\frac{\hbar^2}{\mu} \langle \phi_{\alpha} | \frac{\partial \phi_{\beta}}{\partial R} \rangle \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \langle \phi_{\alpha} | \frac{\partial^2 \phi_{\beta}}{\partial R^2} \rangle \right) F_{\beta}(R) \end{aligned}$$

Généralisation du modèle asymptotique

- Courbes de potentiel **asymptotique** du fondamental incluant la structure hyperfine :

$$H_{as}(R) = D_{hfs} - \frac{M_6}{R^6} - \frac{M_8}{R^8} - \frac{M_{10}}{R^{10}} + M_{echg} f_{echg}(R)$$

- Éléments de matrice calculés dans la base :

$$|\gamma (ns^2S_{1/2} I \mathbf{F}_1) (ns^2S_{1/2} I \mathbf{F}_2) F_t m_{F_t}\rangle_{s,a}$$

- Diagonalisation de $H_{as}(R)$

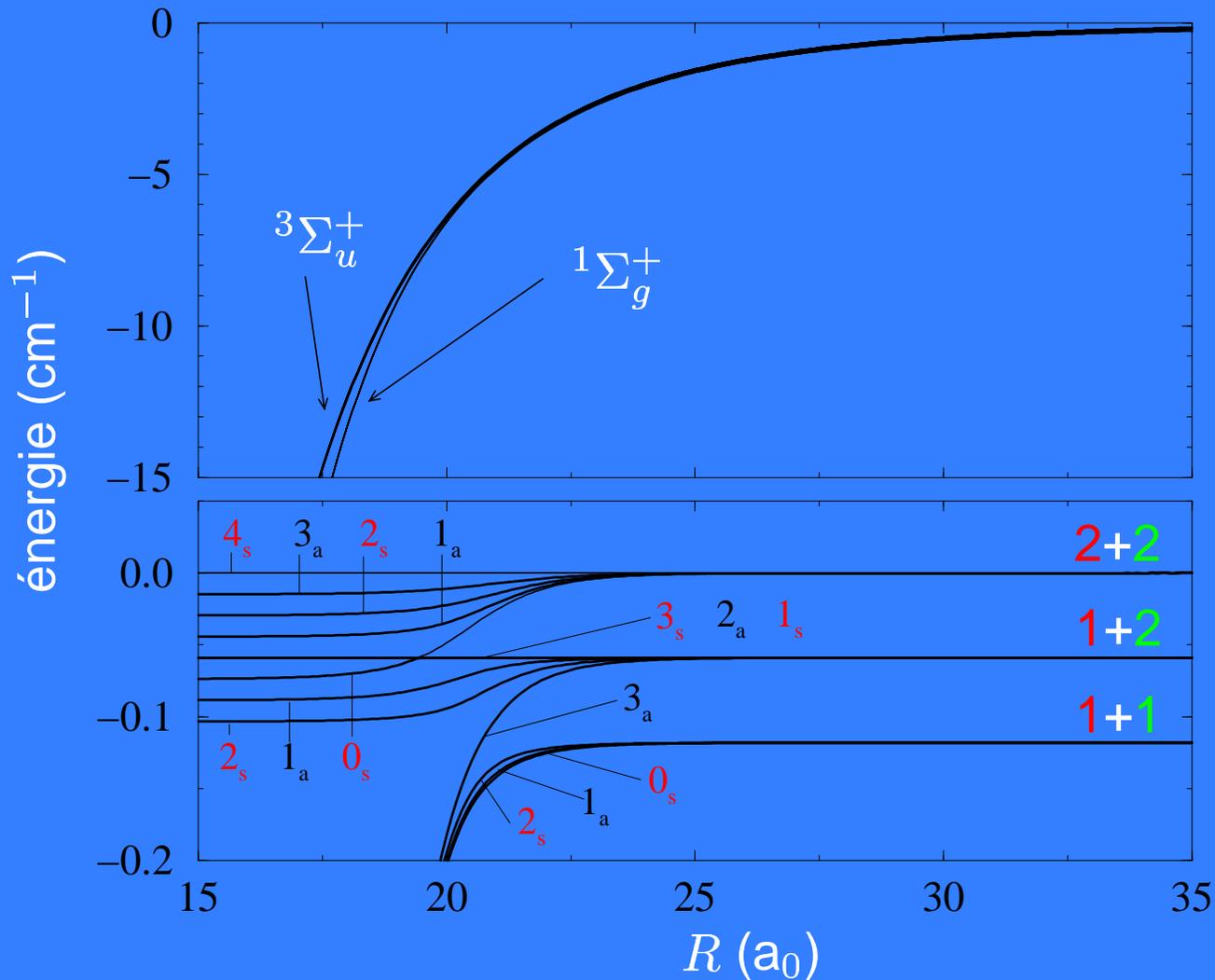
→ potentiels adiabatiques du fondamental $V_\alpha(R)$

→ **couplages** obtenus à partir des **vecteurs propres** adiabatiques

$$\phi_\alpha(R, \{\vec{r}_i\})$$

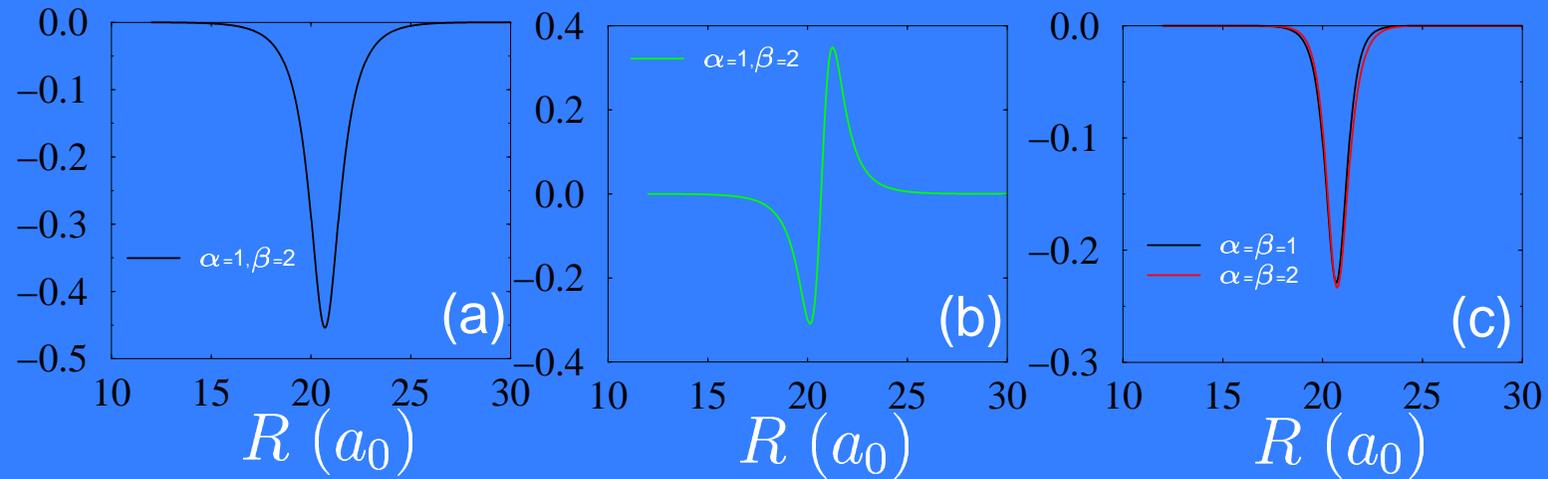
Courbes de potentiels adiabatiques

- Exemples de courbes de potentiels adiabatiques $V_\alpha(R)$ (pour Na_2) :



Couplages non-adiabatiques

- Exemples de couplages radiaux (pour Na_2) :



- Couplages d'ordre 1 : $\langle \phi_\alpha | \frac{\partial \phi_\beta}{\partial R} \rangle$ (courbes (a))
- Couplages d'ordre 2 : $\langle \phi_\alpha | \frac{\partial^2 \phi_\beta}{\partial R^2} \rangle$ (courbes (b) et (c))

\rightsquigarrow Couplages très localisés

Intégration numérique : états liés

- Deux solutions linéairement indépendantes (I, II) :

$$(\{F_1^I, F_2^I\}, \{F_1^{II}, F_2^{II}\})$$

- Solution « physique » :

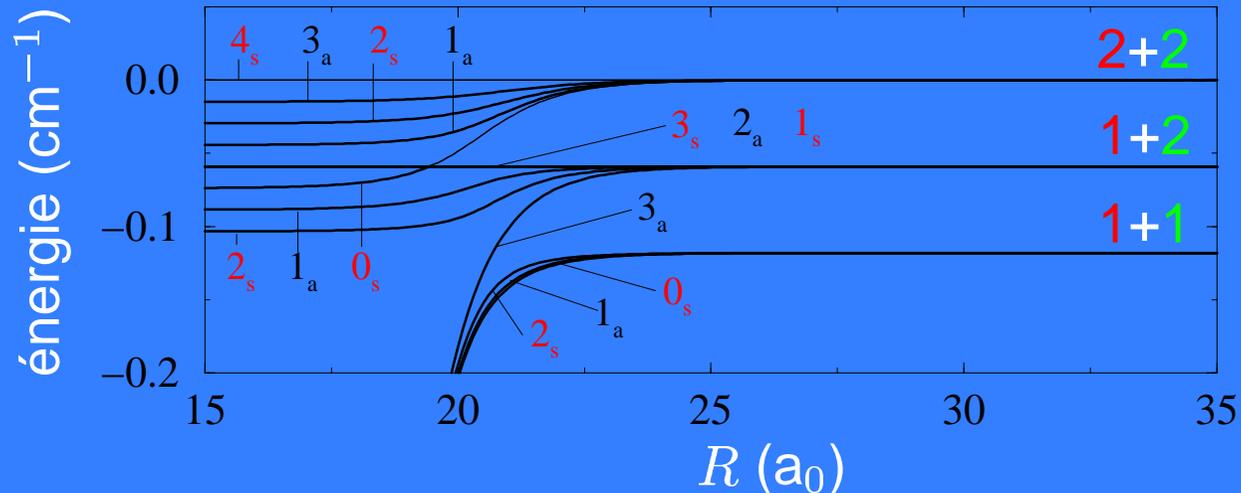
$$F_\alpha(R) = aF_\alpha^I(R) + bF_\alpha^{II}(R) \quad (\alpha = 1, 2)$$

$$\begin{pmatrix} F_1(R_S) \\ F_2(R_T) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} F_1^I(R_S) & F_1^{II}(R_S) \\ F_2^I(R_T) & F_2^{II}(R_T) \end{pmatrix}}_{\text{Mat}(E)} \times \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

- $\text{Det}(\text{Mat}(E)) = 0 \longrightarrow$ état lié

Données expérimentales : $\text{Na}(3s)+\text{Na}(3s)$

- 54 niveaux liés compris entre $0, 11150 \text{ cm}^{-1}$ et $-4, 29238 \text{ cm}^{-1}$
- Erreurs expérimentales comprises entre $0, 0005 \text{ cm}^{-1}$ et $0, 0025 \text{ cm}^{-1}$
- $F_t = 0, 1, 2, 3, 4$ $\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5$
 - 1 seule voie : 11 niveaux
 - 2 voies couplées : 17 niveaux
 - 3 voies couplées : 26 niveaux



Détermination des lignes de nœuds

- Procédure d'ajustement :

$$\chi^2(\varpi) = \sum_{n=1}^{54} \left(\frac{\left(E_{\{F_t, \ell\}}^{exp} \right)_n - \left(E_{\{F_t, \ell\}} \right)_n(\varpi)}{\left(\sigma_{\{F_t, \ell\}}^{exp} \right)_n} \right)^2$$

- Pour prendre en compte tous les niveaux, il faut modifier la relation définissant les lignes de nœuds :

$$R_{S/T} = \underbrace{\tilde{R}_{S/T}^0 + \beta_{S/T} \times \ell(\ell + 1)}_{R_{S/T}^0} + p_{S/T} \times E$$

Détermination des lignes de nœuds

- Procédure d'ajustement :

$$\chi^2(\varpi) = \sum_{n=1}^{54} \left(\frac{\left(E_{\{F_t, \ell\}}^{exp} \right)_n - \left(E_{\{F_t, \ell\}} \right)_n(\varpi)}{\left(\sigma_{\{F_t, \ell\}}^{exp} \right)_n} \right)^2$$

- Pour prendre en compte tous les niveaux, il faut modifier la relation définissant les lignes de nœuds :

$$R_{S/T} = \underbrace{\tilde{R}_{S/T}^0 + \beta_{S/T} \times \ell(\ell + 1)}_{R_{S/T}^0} + p_{S/T} \times E$$

- $N_{niv} = 54$, $N_{param} = 12$
- Lignes de nœuds triplet : $\tilde{R}_T^0((F_1, F_2); (F_t)_\varepsilon)$ (7 paramètres), β_T , p_T
- Ligne de nœuds singulet : \tilde{R}_S^0 , β_S , p_S

Détermination des lignes de nœuds

- Procédure d'ajustement :

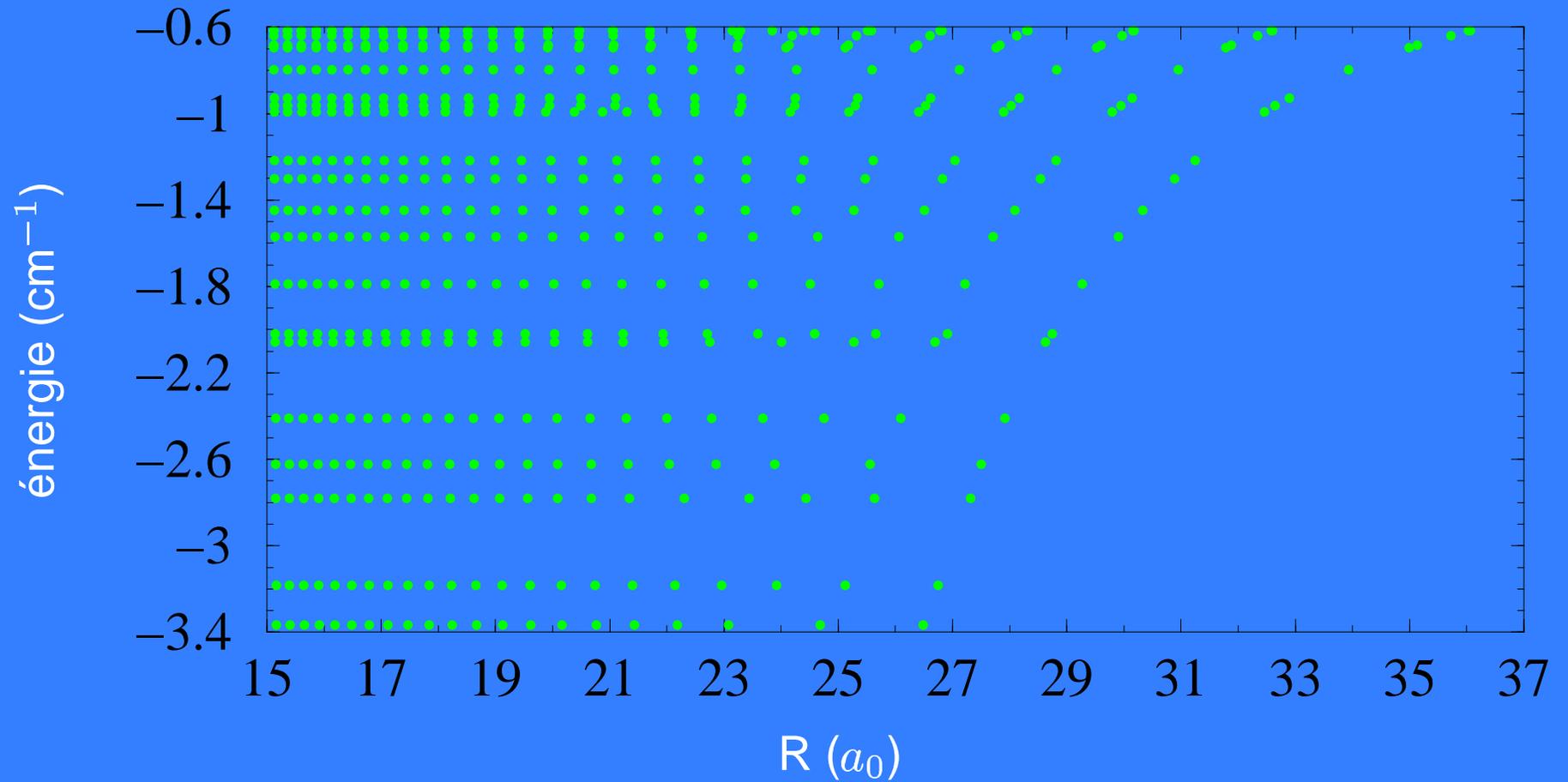
$$\chi^2(\varpi) = \sum_{n=1}^{54} \left(\frac{\left(E_{\{F_t, \ell\}}^{exp} \right)_n - \left(E_{\{F_t, \ell\}} \right)_n(\varpi)}{\left(\sigma_{\{F_t, \ell\}}^{exp} \right)_n} \right)^2$$

- $N_{niv} = 54$, $N_{param} = 12$

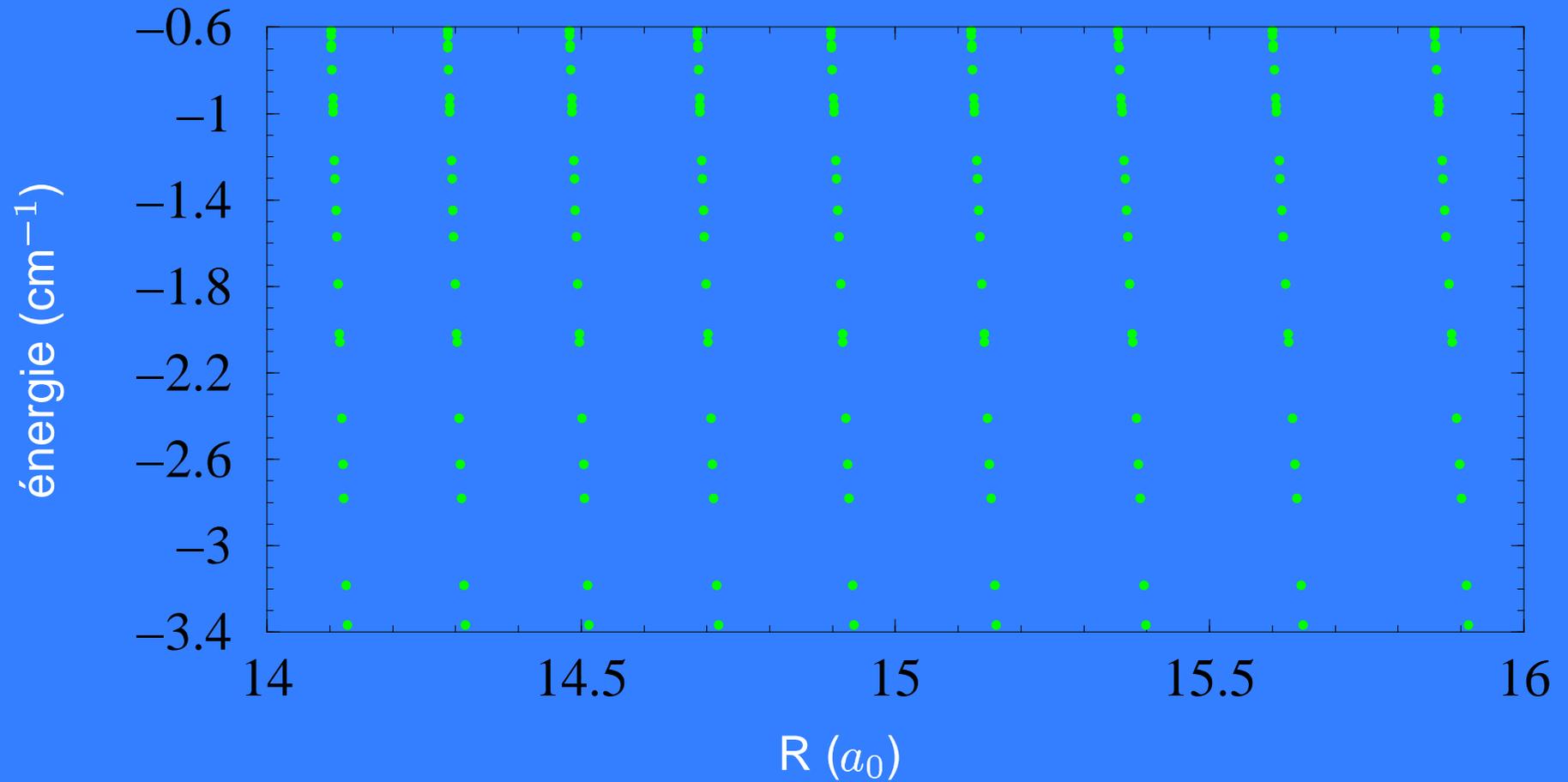
- $\sigma(\hat{\varpi}) = \sqrt{\chi^2(\hat{\varpi}) / (N_{niv} - N_{param})} = 0,388$

$\hat{\varpi}$: jeu de paramètres minimisant le $\chi^2(\varpi)$

Lignes de nœuds (voie (2))



Lignes de nœuds (voie (2))



Longueurs de diffusion $\mathcal{L}_{F_t}(F_1, F_2)$

1. $\mathcal{L}_4(2, 2) = 64,5 a_0$
2. $\mathcal{L}_2(2, 2) = 46,0 a_0$
3. $\mathcal{L}_0(2, 2) = 35,0 a_0$
4. $\mathcal{L}_3(1, 2) = 64,5 a_0$
5. $\mathcal{L}_2(1, 2) = 41,0 a_0$
6. $\mathcal{L}_1(1, 2) = 64,5 a_0$
7. $\mathcal{L}_2(1, 1) = 54,8 a_0$
8. $\mathcal{L}_0(1, 1) = 49,3 a_0$



Longueurs de diffusion $\mathcal{L}_{F_t}(F_1, F_2)$

$$a_T \rightarrow \begin{array}{ll} 1. \mathcal{L}_4(2, 2) = 64,5 a_0 & 5. \mathcal{L}_2(1, 2) = 41,0 a_0 \\ 2. \mathcal{L}_2(2, 2) = 46,0 a_0 & 6. \mathcal{L}_1(1, 2) = 64,5 a_0 \\ 3. \mathcal{L}_0(2, 2) = 35,0 a_0 & 7. \mathcal{L}_2(1, 1) = 54,8 a_0 \leftarrow a_{1,-1} \\ 4. \mathcal{L}_3(1, 2) = 64,5 a_0 & 8. \mathcal{L}_0(1, 1) = 49,3 a_0 \end{array}$$

- $a_T = 65,3 \pm 0,9 a_0$ et $a_{1,-1} = 55,4 \pm 1,2 a_0$
(F.A. van Abeelen *et al.*, Phys. Rev. A **59**, 578 (1999))
- $\mathcal{L}_0(1, 1) = 50,0 \pm 1,6 a_0$ et $a_{1,-1} = 55,1 \pm 1,6 a_0$
(A. Crubellier *et al.*, Eur. Phys. J. D **6**, 211 (1999))
- $a_T = 63,9 a_0$ et $a_{1,-1} = 54,6 a_0$
(F.H. Mies *et al.*, Phys. Rev. A **61**, 022721 (2000))
- $a_T = 62,51 \pm 0,5 a_0$ et $a_{1,-1} = 52,98 \pm 0,4 a_0$
(C. Samuelis *et al.*, Phys. Rev. A **63**, 012710 (2000))

Conclusion et perspectives

- Les modèles asymptotiques sont simples et intuitifs : structure nodale
- Ce sont des **méthodes paramétriques** où l'information liée à l'histoire de la collision dans la zone interne est remplacée par un **faible nombre de paramètres**
- Ces méthodes peuvent fournir des informations concernant à la fois les propriétés collisionnelles (longueurs de diffusion, ...) et les potentiels asymptotiques (C_6 , échange, ...)

Conclusion et perspectives

Perspectives :

- D'autres études spectroscopiques (dimères alcalins hétéronucléaires, autres éléments, ...)
- Étude des résonances de Feshbach induites par champ magnétique
- Étude du contrôle par un champ magnétique de la valeur de la longueur de diffusion du césium pour des atomes dans l'état $(6s) f = 3, M_f = 3$
- Contrôle de la formation de molécules froides



*Développement de méthodes asymptotiques
pour l'étude des interactions entre atomes
froids*

*Détermination de longueurs de diffusion
du sodium et du césium*

Benoît T'JAMPENS

Laboratoire Aimé Cotton

