



HAL
open science

Atomes de Rydberg en champ micro-onde : régularité et chaos

Andreas Buchleitner

► **To cite this version:**

Andreas Buchleitner. Atomes de Rydberg en champ micro-onde : régularité et chaos. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 1993. Français. NNT : . tel-00011885

HAL Id: tel-00011885

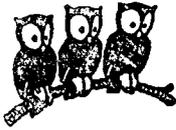
<https://theses.hal.science/tel-00011885>

Submitted on 9 Mar 2006

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.

Département de Physique de l'Ecole Normale Supérieure



**LABORATOIRE DE
SPECTROSCOPIE HERTZIENNE**



**Thèse de Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie
Spécialité: Physique Quantique**

présentée par

Andreas BUCHLEITNER

pour obtenir le grade de Docteur de l'Université Pierre et Marie Curie

Sujet de la thèse:

**ATOMES DE RYDBERG EN CHAMP MICRO-ONDE:
REGULARITE ET CHAOS**

soutenue le 13 décembre 1993 devant le jury composé de:

M. Oriol BOHIGAS

M. Dominique DELANDE

M. Italo GUARNERI

M. Serge HAROCHE

Mme Anne L'HUILLIER

M. Alfred MAQUET

Département de Physique de l'Ecole Normale Supérieure



**LABORATOIRE DE
SPECTROSCOPIE HERTZIENNE**



**Thèse de Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie
Spécialité: Physique Quantique**

présentée par

Andreas BUCHLEITNER

pour obtenir le grade de Docteur de l'Université Pierre et Marie Curie

Sujet de la thèse:

**ATOMES DE RYDBERG EN CHAMP MICRO-ONDE:
REGULARITE ET CHAOS**

soutenue le 13 décembre 1993 devant le jury composé de:

M. Oriol BOHIGAS

M. Dominique DELANDE

M. Italo GUARNERI

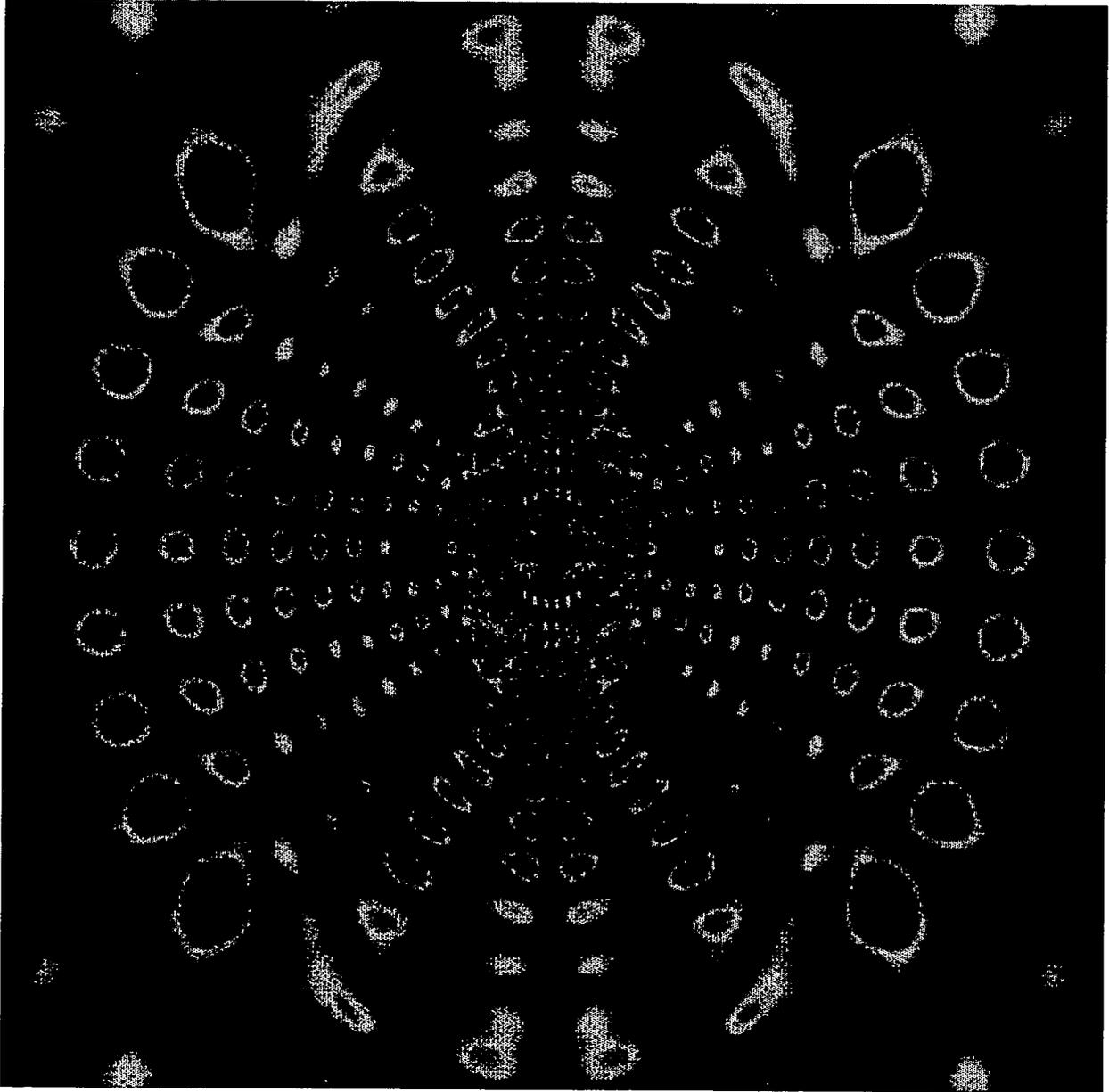
M. Serge HAROCHE

Mme Anne L'HUILLIER

M. Alfred MAQUET

Cette nation
aura pour capitale Paris,
elle ne s'appellera point la France,
elle s'appellera *l'Europe*.

Victor Hugo, 1887



Wer nichts weiß, liebt nichts.
Wer nichts tun kann, versteht nichts.
Wer nichts versteht, ist nichts wert.
Aber wer versteht,
der liebt, bemerkt und sieht auch ...
Je mehr Erkenntnis einem Ding innewohnt,
desto größer ist die Liebe ...
Wer meint, alle Früchte
würden mit den Erdbeeren reif,
versteht nichts von den Trauben.

Paracelsus

Je remercie Jacques Dupont-Roc, Gilbert Grynberg et Bernard Cagnac de m'avoir accueilli au Laboratoire de Spectroscopie Hertzienne de l'Ecole Normale Supérieure, dans sa partie située à Jussieu, et d'avoir signé tout un tas de papiers : dérogations, attestations, etc., qui m'ont permis de survivre face à une bureaucratie française qui m'a obligé à reconsidérer les griefs que j'avais contre la bureaucratie en R.F.A..

J'y joins ma reconnaissance pour Michèle Glass qui m'a aidé à surmonter quelques difficultés administratives liées à la date inhabituelle du début de mon travail.

Je remercie profondément Dominique Delande d'avoir encadré ce travail de thèse, pour la collaboration amicale des trois dernières années, pour sa patience en bonne approximation illimitée, et pour sa rigueur scientifique. Dans le futur proche, je souhaiterais fortement que nous continuions ensemble à structurer le chaos, entre Paris et Garching. J'y joins ma reconnaissance pour Sophie Cribier et PerEliCol qui m'ont maintes fois nourri ou remonté le moral, avant des sessions de travail nocturnes.

Le présent travail a été commencé en janvier 1991, sous la direction de Jean-Claude Gay. Il était déjà trop tard pour qu'on ait pu initier un travail commun et c'est donc Dominique qui m'a appris ce qu'il avait - à son tour - appris de et avec Jean-Claude à une époque moins sombre. J'avais pourtant connu Jean-Claude lors d'un séminaire qu'il avait fait à Garching en printemps 1990, ensuite à Paris, et pendant un workshop à Nordkirchen en juin 1990. On a eu beaucoup de discussions, et pas seulement de physique. Notamment, entre janvier 1991 et mai 1992, il m'a donné un exemple de "vivre debout" que je garderai. Que Marie-Françoise et Ariel Gay soient remerciés pour l'affection qu'ils m'ont conservée depuis.

Je remercie Oriol Bohigas, Italo Guarneri, Serge Haroche, Anne L'Huillier et Alfred Maquet qui ont accepté de participer au jury. Je suis de plus reconnaissant à Giulio Casati et Giorgia Mantica pour une invitation au E.S.F. workshop on Classical Mechanical Methods in Quantum Mechanics, à Dima Shepelyansky, Reinhold Blümel, Shmuel Fishman, Bala Sundaram et Rainer Scharf pour des conseils et discussions utiles et intéressants.

Cela a été et reste pour moi un plaisir de travailler, discuter et rire avec Benoît Grémaud, François Bastin, Kasia & Kuba Zakrzewski, et Peter Braun. Ils m'ont tous soutenu pendant les phases critiques de ce travail et je les en remercie vivement. Ainsi qu'aux visiteurs Astrid Lambrecht, Jérôme Mertz, Mischa Kolobov, Anna, Clara & Paulo Maia Neto, Hanneke & Tony van der Veldt, Andreas Sizmann, Jakob Reichel, qui, avec Benoît, François, Valérie & Jean-Yves Courtois, Dominique & Sophie m'ont accompagné dans ma découverte de Paris.

Je tiens enfin à remercier tous les autres membres du laboratoire qui m'ont aidé tout au long de ce travail, notamment Lucile Julien, François Nez, Francis Tréhin, Marc Thommé, Blandine Moutiers, Dominique Giafferi, Irène Brodschi, Catherine Emo, Mlle Gazan, Mme Pelot et M. Manceau d'avoir corrigé des fautes de français, de m'avoir indiqué quelques astuces indispensables pour la préparation du dossier de soutenance, d'avoir protégé mon disque dur de trop de chocs

électriques, de la familiarisation avec les vins français, d'avoir géré et transmis tous les aspects administratifs de mon contract européen entre Jussieu et l'E.N.S., de les avoir négociés - à ma place et dans mon intérêt - avec Mlle P. qui n'a pas toujours facilité les choses, de m'avoir conseillé pendant la préparation du manuscrit et d'assurer le tirage de la thèse.

Que soient aussi remerciées l'Association Sportive, et surtout les équipes de handball de l'Ecole Normale & Physique Chimie, notamment Nathalie & Alain, Nathalie (LB), Jérôme, François, Emmanuel, Xavier, Vincent, Didier, Simon (VG) et Jean (Balenci; qui m'a expulsé pendant un match, la première fois de toute ma carrière), qui m'ont accueilli et qui m'ont ainsi permis de me libérer un peu l'esprit, entre deux diagonalisations de matrices monstrueuses.

Parmi la communauté scientifique, il me reste encore à remercier Leszek Sirko, qui m'avait - il y a quatre ans - "poussé" aux Houches et qui a ainsi contribué au fait que j'ai effectué mon travail de thèse à Paris.

Le soutien financier généreux de la Communauté Européenne a permis mon séjour en France, je lui en suis très reconnaissant.

Le centre de calcul de l'Université Pierre et Marie Curie et le CCVR ont contribué de manière notable au succès du présent travail. De l'ordre de deux à trois mille heures ont été dépensées sur le CRAY-YMP-EL (Jussieu) et le CRAY2 (Palaiseau).

Last, but not least, danke ich schließlich meinen Eltern und meinem Onkelchen, je zwei Tanten und Onkeln, sowie den lieben Cousinen, die mich während der letzten drei Jahre nicht nur mit diversen CARE-Paketen sowie gesponsorten Restaurantbesuchen rein physisch über Wasser gehalten haben, sondern, viel wichtiger, für den ideell-moralischen Beistand sorgten.

Ebenso gilt mein Dank den Freunden in München, Palermo und Vancouver, die mir auch auf die Distanz Freunde geblieben sind. "Habt Dank für das Achtel Lorbeerblatt ..."

Enfin, je remercie encore Mme Irene Scholz-Fuchshuber, qui m'a appris le français au lycée. Ses efforts ne me semblent pas avoir été vains, avec un taux de décroissance à ma propre surprise assez faible. Le reste a été assuré par les copains à Paris qui ont pris la peine d'améliorer ce qu'il fallait.

Table des matières

I	Introduction	1
1	La “localisation dynamique” dans un champ micro-onde	9
1.1	Quelques notions clés sur la localisation dynamique	11
1.1.1	Aspects globaux ou universels	11
1.1.2	Aspects locaux	14
1.2	Expériences sur l’excitation et l’ionisation des atomes de Rydberg par un champ micro-onde	17
2	Stabilisation dans un champ laser	21
II	Fondement théorique	25
3	Dynamique classique	31
3.1	Équations du mouvement classiques	32
3.2	Lois d’échelles	34
3.3	Les variables action-angle	36
4	Dynamique quantique	41
4.1	L’interaction entre atome et champ	44
4.2	La représentation des degrés de liberté atomiques	47
4.2.1	Éléments de matrice dans une base Sturmienne sphérique .	48
4.2.2	Les bases paraboliques et “lambda”	52
4.3	Le couplage au continuum et la dilatation complexe	57
4.4	Quelques quantités physiques	65
4.4.1	La probabilité d’ionisation	65
4.4.2	La dynamique des fonctions d’onde dans l’espace de confi- guration	67
4.4.3	La distribution de Husimi du modèle unidimensionnel . . .	69
4.5	Réalisation numérique	72
III	Simulations Numériques	81
5	L’atome de Rydberg unidimensionnel	85
5.1	Les différents points de vue	86

5.2	Une expérience typique	88
5.3	Probabilité et seuil d'ionisation	91
5.3.1	La probabilité d'ionisation en fonction du temps d'interaction	91
5.3.2	La probabilité d'ionisation en fonction de l'amplitude du champ	93
5.3.3	Le seuil d'ionisation en fonction de la pulsation du champ	95
5.4	Analyse des résultats et première comparaison aux expériences . .	99
5.4.1	Dépendance globale du seuil avec la pulsation réduite . . .	99
5.4.2	Structures locales de $F_0(10\%)$ en fonction de ω_0	104
5.4.3	Conclusion	106
5.5	Niveaux d'énergie et seuil d'ionisation	107
5.5.1	Non-monotonies du signal d'ionisation	107
5.5.2	Les structures non-monotones et leur dépendance avec la pulsation	110
5.5.3	La dynamique des niveaux au voisinage de $n_0 = 62$	115
5.5.4	La dynamique des niveaux et la stabilité anormale de Koch et al.	120
5.6	Signaux et seuils d'ionisation à temps d'interaction variable	121
5.6.1	Le temps d'interaction et la "stabilité anormale" de $n_0 = 62$	122
5.6.2	La dépendance temporelle du seuil d'ionisation	125
5.7	Structures classiques et quantiques dans l'espace des phases . . .	132
5.7.1	Structures classiques	132
5.7.2	Structures quantiques	134
5.7.3	Conclusion	160
6	Les atomes "réels" dans un champ oscillant	165
6.1	L'ionisation d'un état de haute excentricité	165
6.2	Aspects spectraux et fonctions propres	172
6.2.1	Zoologie générale des états de Floquet	172
6.2.2	Les familles de $n_0 = 21$, $n_0 = 23$ et $n_0 = 24$	177
6.2.3	Dynamique temporelle et seuils d'ionisation	185
6.2.4	Les cicatrices de l'atome tridimensionnel	199
6.2.5	Conclusion	205
6.3	La stabilisation adiabatique d'un état circulaire	206
6.3.1	Stabilisation adiabatique	206
6.3.2	La dynamique de la densité électronique	207
7	Conclusion	215
	Bibliographie	217

Première partie

Introduction

Man darf freilich nicht glauben, die Menschen hätten bald bemerkt, daß ein Wolkenkratzer größer sei als ein Mann zu Pferd; im Gegenteil, noch heute, wenn sie etwas besonderes von sich hermachen wollen, setzen sie sich nicht auf den Wolkenkratzer, sondern aufs hohe Roß, sind geschwind wie der Wind und scharfsichtig, nicht wie ein Riesenrefraktor, sondern wie ein Adler. Ihr Gefühl hat noch nicht gelernt, sich ihres Verstandes zu bedienen, und zwischen diesen beiden liegt ein Unterschied der Entwicklung, der fast so groß ist wie der zwischen dem Blinddarm und der Großhirnrinde.

Robert Musil, *Der Mann ohne Eigenschaften*.

Parmi les problèmes les plus intéressants de la physique atomique actuelle, d'un point de vue purement théorique, numérique ou expérimental, se trouve l'interaction atome-champ, dans une vaste gamme de fréquence.

Ce système, qui paraît simple au premier coup d'œil - ses constituants sont individuellement parfaitement compris - fournit l'occasion d'étudier l'interaction matière-rayonnement dans des conditions hautement nonlinéaires et donc très inhabituelles. Ces études ouvrent des perspectives nouvelles sur l'échange d'énergie entre l'atome et le champ, sur le transport et la redistribution d'énergie parmi les degrés de liberté internes de l'atome et sur la radiation secondaire émise par l'atome, pour mentionner quelques directions principales. De plus, l'atome d'hydrogène ou d'autres atomes avec un seul électron de valence deviennent ainsi des "prototypes" pour l'étude des systèmes complexes (pas nécessairement chaotiques au sens strict du terme) qui prennent de plus en plus d'importance, par exemple dans l'étude du transfert d'énergie dans les réactions moléculaires, des propriétés de conductivité des systèmes mésoscopiques [1], de la localisation de la lumière par diffusion multiple dans des matériaux désordonnés [2] et - pour en revenir à la physique atomique - des processus multiphotoniques [3]. La simplicité des constituants du système permet un contrôle *relativement* exact du nombre de canaux de réaction et de la nonlinéarité des processus considérés, par un choix approprié des paramètres caractérisant l'interaction.

Bien que la nonlinéarité soit prohibitive pour une compréhension purement analytique des phénomènes, le petit nombre de composants du système facilite une chronologie assez détaillée de l'histoire individuelle de chacun d'eux et des produits transitoires pendant leur interaction, via une approche expérimentale traditionnelle et encore plus par le moyen plus récent des expériences numériques qui commencent à définir une troisième branche de la physique moderne, entre la théorie et l'expérience traditionnelle.

Le présent mémoire porte sur une telle expérience numérique simulant l'interaction des atomes d'hydrogène avec un champ micro-onde ou laser intense. Après une introduction générale des phénomènes physiques spécifiques auxquels nous allons nous intéresser (cf. 1), et une description de la situation théorique (cf. 1.1) et expérimentale (cf. 1.2) récente, nous allons développer notre cadre théorique (cf. 3 et 4) et décrire le "dispositif expérimental" dont nous nous servirons pendant nos simulations. Nous présenterons ensuite les résultats de nos études numériques (cf. 5 et 6, pour l'essentiel dans le régime de paramètres caractérisant l'interaction d'atomes de Rydberg avec un champ micro-onde. En abordant un phénomène précis prédit pour l'interaction d'atomes d'hydrogène faiblement excités avec un champ laser ultra-intense, nous montrerons enfin (cf. 6.3) l'applicabilité de notre appareil technique sur toute la gamme de fréquence des micro-ondes aux lasers.

Nous nous concentrerons sur des propriétés du système atome-champ qui sont brièvement caractérisées comme "stabilisation" de l'atome vis-à-vis de l'ionisation par la perturbation externe et interprétées par une "localisation" de la fonction d'onde électronique le long des divers degrés de libertés du complexe atome-champ.

Suivant les valeurs des paramètres externes et internes de notre problème général, on observe en fait *différents* phénomènes de stabilisation qui ont *a priori* des origines bien distinctes. Nous comprenons ici par “paramètres externes” la polarisation, l’amplitude, la fréquence et l’enveloppe de l’impulsion de champ électromagnétique vue par les atomes, tandis que les “paramètres internes” préciseront dans la suite l’état d’excitation de ces derniers. Une première classification de ces phénomènes peut être effectuée à partir d’une comparaison entre amplitude du champ extérieur et champ Coulombien vu par l’électron sur son orbite de Kepler non perturbée, ainsi que le rapport entre l’énergie d’un photon du champ de radiation et l’énergie de l’état initial des atomes.

Dans le domaine optique, l’énergie du photon est de l’ordre de l’énergie de l’état initial. Nous avons typiquement un champ externe dont l’amplitude est comparable ou supérieure au champ Coulombien et la symétrie (cylindrique) du problème est donc imposée par celle de la perturbation et pas par le potentiel central. Celui-ci prend le caractère d’une perturbation du potentiel engendré par le champ oscillant et nous envisageons ainsi une structure atomique fortement distordue [4, 5, 6], en général aussi bien pour les états liés que pour les états du continuum. L’atome et le champ perdent leur identité individuelle et il vaut mieux parler d’un complexe atome-champ.

Dans le domaine des sources micro-onde et des états initiaux très excités, la fréquence du champ est de l’ordre de la distance énergétique de l’état initial au niveau voisin et il faut par conséquent entre une dizaine et une centaine de photons pour accéder au continuum, par une transition multiphotonique. Induire un taux d’ionisation non-négligeable par le champ externe veut alors dire attribuer un poids équivalent aux différentes contributions d’ordres croissants en photons dans un développement perturbatif de l’interaction atome-champ. On est donc confronté à une situation hautement non perturbative, qui n’est pas due à la distorsion de la structure atomique, mais à la nonlinéarité de l’interaction entre les constituants qui gardent essentiellement leur individualité. Le champ externe ne domine *jamaïs* l’interaction Coulombienne, mais est plutôt d’un ordre de grandeur plus faible.

Nous commencerons par une introduction détaillée de la stabilité relative d’un atome de Rydberg vis-à-vis de l’ionisation par un champ micro-onde, *par rapport à son homologue classique*. Ce phénomène définira le sujet principal du présent travail. Une description qualitative du mécanisme à l’origine de cette stabilité sera suivie par un résumé de la situation expérimentale actuelle qui nous guidera pendant la suite.

Ayant distingué ainsi les deux domaines où se produisent les différents phénomènes de stabilisation, nous allons esquisser de manière plus détaillée les caractéristiques principales de ceux-ci.

Finalement, bien que le domaine des lasers intenses de haute fréquence n’occupe pas la partie centrale de cette thèse, il permet d’illustrer notre contexte global au sein de la physique atomique. Il connaît toute une variété de méca-

nismes de stabilisation. Nous allons isoler un phénomène bien précis qui servira à établir un lien entre le régime optique et le régime micro-onde (cf. 6.3).

Chapitre 1

La “localisation dynamique” dans un champ micro-onde

Introduisons le sujet central de cette thèse, la stabilisation d’un atome de Rydberg dans un champ micro-onde cohérent de polarisation linéaire, effet connu sous le nom de “localisation dynamique” [7].

Notons d’abord que “stabilisation” se réfère ici à l’impact stabilisant *des effets de cohérence quantique* sur un processus d’ionisation dont l’analogie classique est marqué par une dynamique *instable* de l’électron de Rydberg. La figure 1.1 montre la manifestation expérimentale de ce phénomène [8]: quand la fréquence du champ micro-onde est plus grande que la fréquence de transition de l’état initial à l’état voisin, la dynamique classique (trait pointillé sur la figure) prévoit une *décroissance* du seuil d’ionisation de l’atome avec la fréquence (ceci correspond à l’intervalle $\omega_0 > 1$ sur la figure). Le seuil d’ionisation ($F_0(10\%)$ sur la figure) indique l’amplitude micro-onde qui induit l’ionisation de 10% des atomes qui interagissent avec le champ. Dans les unités utilisées sur la figure (cf. 3.19), il mesure le rapport du champ micro-onde au champ Coulombien vu par l’électron sur son orbite de Kepler. En opposition, la dynamique quantique (ligne continue) prévoit *l’augmentation* du seuil avec la fréquence, dans le domaine $\omega_0 > 1$. La figure montre ces deux prévisions et quelques points expérimentaux qui confirment bien la stabilité accrue du système quantique.

La partie la plus volumineuse du présent travail sera consacrée à l’étude des aspects de la dynamique quantique qui favorisent ou défavorisent l’émergence de la localisation dynamique. Comme nous serons amenés à revoir l’interprétation d’un grand nombre de données expérimentales obtenues autour de ce phénomène, rappelons d’abord quelques notions clés nécessaires à la compréhension de cette discussion.

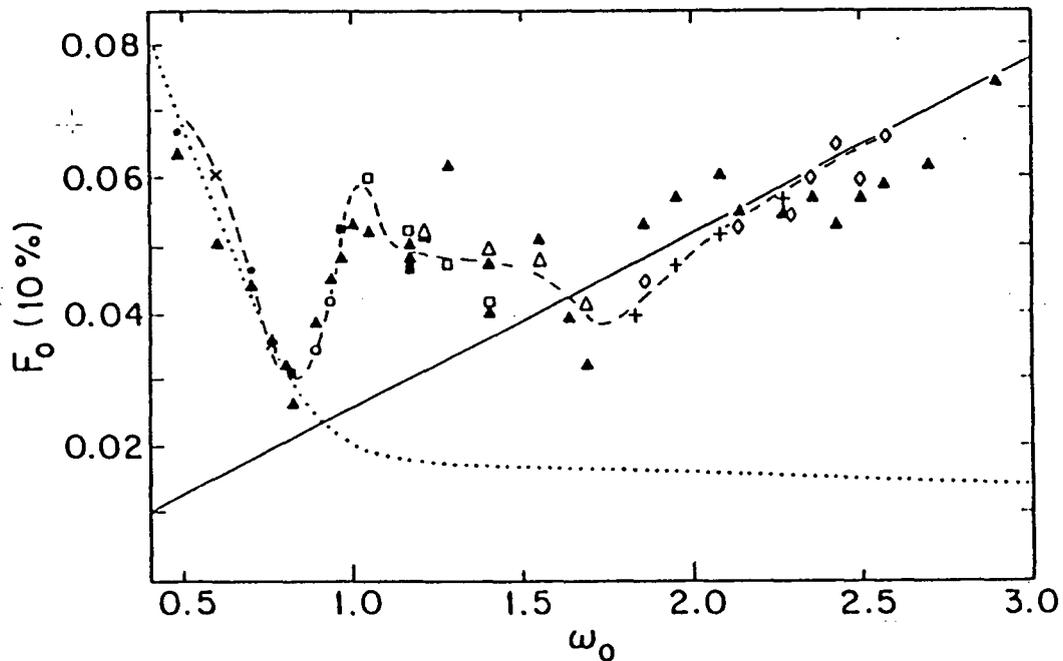


FIG. 1.1 - Manifestation expérimentale de la localisation dynamique [8]. Quand la fréquence du champ micro-onde est plus grande que la fréquence de transition de l'état initial à l'état voisin, la dynamique classique (trait pointillé sur la figure) prévoit une *décroissance* du seuil d'ionisation de l'atome avec la fréquence. Le seuil d'ionisation $F_0(10\%)$ indique l'amplitude micro-onde qui induit l'ionisation de 10% des atomes qui interagissent avec le champ. Dans les unités utilisées (cf. 3.19), il mesure le rapport du champ micro-onde au champ Coulombien vu par l'électron sur son orbite de Kepler. Au contraire, la dynamique quantique (ligne continue) prévoit l'*augmentation* du seuil avec la fréquence, dans le domaine $\omega_0 > 1$. Les atomes de Rydberg préparés initialement dans des états de nombre quantique principal voisin de $\simeq 80$ obéissent bien à la prévision de la mécanique quantique.

1.1 Quelques notions clés sur la localisation dynamique

Nous avons déjà remarqué que la localisation dynamique désigne un effet stabilisant de la mécanique quantique par rapport à une dynamique classique irrégulière. Son intérêt principal réside donc dans la comparaison des propriétés du transport quantique à celles du transport classique, dans des conditions physiques qui induisent une forte nonlinéarité des équations du mouvement classiques.

Cette comparaison peut être réalisée à un niveau global aussi bien que local de la dynamique des deux domaines. Le premier permettra l'identification de certains effets de caractère "universel", qui ne dépendent que de quelques propriétés assez générales de la réalisation physique concrète. Le deuxième exploitera toute la richesse de la dynamique en fonction des différents paramètres, ce qui imposera en revanche des limites sur la généralité des conclusions tirées. Nous nous mettons d'abord dans la perspective globale.

1.1.1 Aspects globaux ou universels

Comme on l'a observé pour la première fois dans l'expérience de Bayfield et Koch de l'année 1974 [9], l'ionisation d'un électron de Rydberg dans un champ micro-onde suffisamment intense obéit à un *comportement de seuil* du signal d'ionisation non pas avec la fréquence, mais avec *l'intensité* de la perturbation extérieure. La figure 1.2 montre un tel signal d'ionisation, pour trois états initiaux différents de l'atome [10], obtenu dans une expérience récente. Cette signature typiquement classique, que l'on semble avoir écartée depuis la description de l'effet photoélectrique aux origines de la mécanique quantique, a stimulé une analyse du mouvement classique. Celle-ci a mis en évidence une correspondance étroite entre la valeur du seuil d'ionisation expérimental et la transition de la dynamique classique d'un régime régulier à un régime largement chaotique. Comme la dynamique classique obéit à certaines lois d'échelle (cf. (3.17)), le même comportement a été prédit pour les atomes réels et observés expérimentalement. Tandis que ces premières expériences avaient été effectuées en utilisant des fréquences de micro-onde inférieures à la fréquence de Kepler de l'électron atomique, les études théoriques ont été étendues de manière naturelle à des valeurs plus grandes que cette fréquence interne de l'atome. La comparaison des processus classique et quantique a ensuite donné lieu à l'introduction du concept de "localisation dynamique" [11, 12]: pour des fréquences au-dessus de la fréquence de Kepler de l'électron de Rydberg, le seuil d'ionisation de l'atome quantique est systématiquement *plus élevé* que le seuil prévu par une simulation classique (cf. fig. 1.1). Au contraire, dans le régime basse fréquence, les modèles quantique et classique fournissent en gros les mêmes résultats.

Ce phénomène a été interprété par un argument qualitatif fondé sur la nature discrète du spectre quantique. Tandis que l'ionisation de l'électron de Rydberg classique via une "excitation chaotique" induite par le champ externe peut être

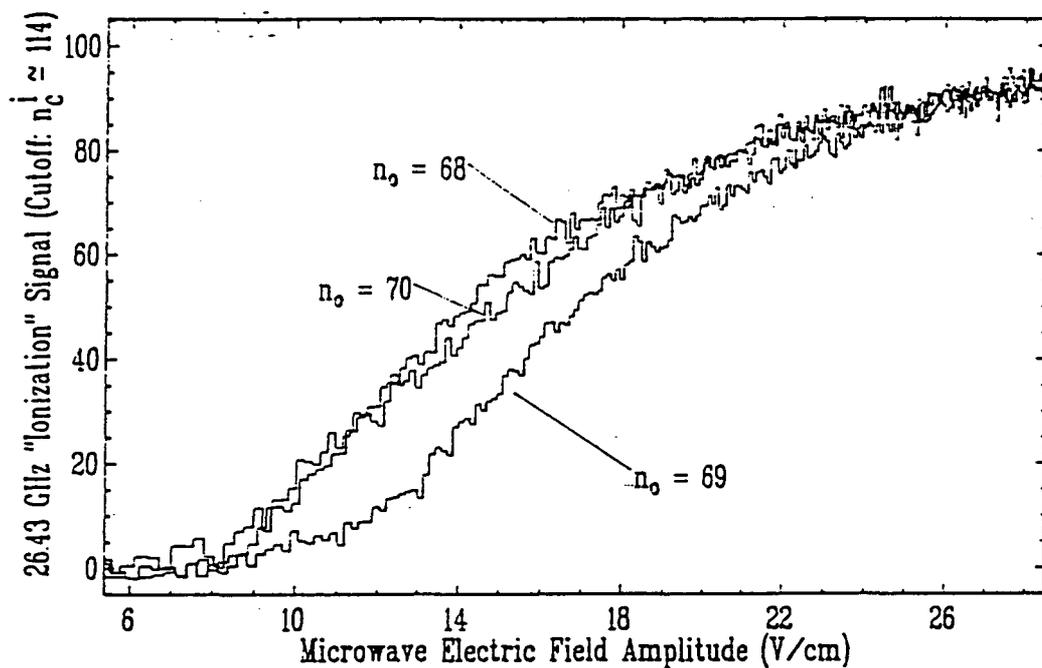


FIG. 1.2 - Probabilité d'ionisation d'atomes de Rydberg d'hydrogène de nombre quantique principal $n_0 = 68, 69$ et 70 , en fonction de l'amplitude du champ micro-onde [10]. Fréquence de la micro-onde: 26.43 GHz. On aperçoit bien le comportement de seuil de la probabilité d'ionisation en fonction de l'amplitude du champ.

décrite par un processus de diffusion suivant l'action (et donc suivant l'énergie), l'évolution quantique n'obéira à cette description que sur l'échelle de temps définie par l'inverse de la distance moyenne entre les niveaux d'énergie du système. Pour des temps plus longs, la largeur de la distribution de la probabilité quantique sur les états propres restera en moyenne stationnaire, contrairement à la largeur de la distribution classique qui croît avec la racine carrée du temps. On observe donc une *localisation* de la population quantique suivant le nombre quantique principal quand l'analogie classique montre une diffusion non bornée suivant la variable classique correspondante, c'est-à-dire l'action.

Cette localisation a été qualifiée d'effet *dynamique* (en tant que résultant d'un potentiel qui montre une dépendance explicite avec le temps), en opposition avec un autre phénomène de localisation décrit [13, 14] pour le transport de charges dans un réseau désordonné unidimensionnel d'un état solide. On observe là une localisation du paquet d'onde électronique dans l'espace de configuration, ce qui réduit la conductivité de l'échantillon en fonction du rapport entre sa taille et l'extension caractéristique du paquet d'onde localisé. On a pu montrer [11, 15] que cette "localisation d'Anderson" peut être formellement identifiée avec la localisation dynamique, par l'élimination de la dépendance temporelle de l'hamiltonien de l'atome de Rydberg dans un champ micro-onde cohérent. Ceci se fait en profitant de la périodicité de la perturbation et ensuite du théorème de Floquet qui garantit l'existence de certaines solutions de l'équation de Schrödinger qui sont stationnaires dans un espace de Hilbert élargi par la dimension du temps. L'analogie avec le problème d'états solides s'établit par l'identification de ces états propres (discrets) avec les sites du réseau désordonné. Dans les deux cas, la localisation quantique se révèle comme conséquence d'une interférence destructive aléatoire entre les diverses amplitudes de probabilité. Si l'extension caractéristique du paquet d'onde localisé est petite devant la taille de l'échantillon ou devant le potentiel d'ionisation de l'état initial des atomes exposés à la micro-onde, la localisation implique une diminution considérable de la conductivité ou un ralentissement de l'ionisation des atomes par excitation "chaotique". Si, au contraire, les deux échelles de "longueur" sont comparables, la conductivité et ainsi le taux d'ionisation peuvent dépendre très sensiblement des paramètres individuels définissant la situation physique. Cela est l'origine des "fluctuations de conductivité universelles" [16, 17, 18] et de l'intérêt de l'ionisation des atomes de Rydberg par une micro-onde dans le contexte des systèmes mésoscopiques [1].

En conclusion, nous voyons bien qu'une perspective globale n'implique que des propriétés générales du système qui s'expriment par la comparaison d'un petit nombre d'échelles caractéristiques bien définies pour une large classe de systèmes physiques. Un tel point de vue est assez typique d'une démarche style théorie de diffusion, qui ne s'intéresse qu'au comportement asymptotique d'un système. Il n'est pas étonnant que la théorie des matrices aléatoires [19] fournisse alors la caractérisation la plus générale de la localisation dynamique [20, 21, 22].

Comme cette théorie est dans un sens une synthèse entre une description statistique du volume de réaction et la théorie de diffusion, il est aussi évident que

cette image ne peut pas décrire les détails de l'excitation de l'atome par le champ externe. En revanche, elle décrit les caractéristiques principales de l'ionisation de l'atome, car ce sont essentiellement les propriétés *asymptotiques* de la fonction d'onde atomique localisée qui déterminent le couplage au continuum. S'il n'en était pas ainsi, on s'attendrait à des taux d'ionisation beaucoup plus élevés que ceux observés dans les expériences. Comme l'électron de Rydberg passe dans tous ces cas de l'ordre de cent fois ou plus au périhélie de son orbite avant de s'ioniser, la distribution de la densité électronique au voisinage de son maximum ne peut pas être un facteur prépondérant pour le couplage au continuum.

Dans le contexte de la localisation dynamique, il reste en gros trois points clés à éclaircir, du point de vue global du phénomène:

- Pour la localisation d'Anderson, on sait bien que, seulement dans le cas d'un échantillon unidimensionnel, *tous* les états électroniques sont localisés, tandis qu'on trouve des états localisés aussi bien que délocalisés dans une espace de configuration bidimensionnel [23]. Quant à l'ionisation des états de Rydberg, toutes les approches théoriques pour l'interprétation des expériences [8, 10, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32] partent de l'hypothèse d'une dynamique essentiellement unidimensionnelle [7, 11, 12, 15, 25, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42] . Une étude systématique qui explorerait les limites de cette hypothèse reste jusqu'ici inachevée.
- L'analogie entre la localisation dynamique et celle d'Anderson implique - pour le problème micro-onde - la séparation des échelles de temps caractéristiques pour l'émergence de la distribution de population localisée d'une part, et pour le couplage direct des états propres au continuum, d'autre part. Comme la plupart des expériences effectuées jusqu'ici travaillent avec des temps d'interaction qui ne sont pas variables, on n'a que très peu d'informations sur ce point [32, 43, 44].
- L'existence de l'analogie des "fluctuations de conductivité" dans le domaine micro-onde reste jusqu'ici controversée dans la littérature [16, 17, 18].

Nous essayerons de contribuer à la clarification des questions ainsi évoquées, en utilisant une nouvelle approche théorique qui nous fournira quelques informations complémentaires sur l'aspect global que nous venons de traiter, ainsi que sur l'aspect local que nous discutons dans le prochain paragraphe.

1.1.2 Aspects locaux

Nous allons maintenant nous intéresser aux détails de l'excitation atomique pendant le processus d'ionisation par un champ micro-onde. Tandis que la description globale de la localisation dynamique s'intéresse surtout au transport net vers le continuum et donc aux propriétés asymptotiques de la fonction d'onde électronique, on va ici discuter les propriétés de la densité électronique, au voisinage de l'état initial des atomes.

Plus précisément, on étudie les possibles correspondances entre la dynamique classique et la dynamique quantique, dans l'espace engendré par les états liés. Cette démarche est motivée par la constatation du comportement de seuil de l'ionisation non pas avec la fréquence, mais avec l'amplitude de la perturbation, ainsi que par son obéissance aux lois d'échelle classiques. Les deux observations suggèrent très fortement une interprétation classique des résultats expérimentaux.

Pourtant, bien qu'on puisse décrire l'excitation classique globalement par une loi de diffusion ou une marche aléatoire, l'espace des phases n'a en général pas une structure entièrement irrégulière ("hard chaos" [45]). Sur une échelle plus fine on envisage plutôt une sous-division de l'espace des phases entre régions régulières et irrégulières. Le poids relatif du volume de ces régions dépend de manière continue de l'amplitude de la perturbation externe. Plus le champ est intense, plus le volume des régions "chaotiques" est grand.

La métamorphose [46] d'une structure stable en une structure instable est un processus hautement compliqué qui implique des transformations sur toutes les échelles des coordonnées engendrant l'espace des phases. La caractérisation d'une structure stable ou instable s'effectue essentiellement par les propriétés locales au voisinage de ces structures [47]. Localement, le flot peut être représenté par une application linéaire dont la stabilité ou instabilité au sens dynamique est en gros déterminée par le caractère localement attractif ou répulsif, le long des axes principaux. Le logarithme népérien de la plus grande valeur propre de cette application locale linéaire est connu comme l'**exposant de Lyapunov** de la transformation. Comme la conservation du volume dans l'espace des phases (théorème de Liouville) d'un système non dissipatif impose que le produit des valeurs propres de l'application linéaire soit égal à l'unité, l'exposant de Lyapunov ne peut pas prendre des valeurs négatives. La dynamique est **localement stable** s'il vaut zéro et **localement instable** dans les autres cas.

On voit ainsi tout de suite qu'une dynamique stable peut localement être décrite par des courbes entourant l'origine de l'application linéarisant le flot hamiltonien (c'est-à-dire le flot de la probabilité classique dans un système non dissipatif). Pour chaque trajectoire stable, on a donc un voisinage de conditions initiales qui donnent aussi lieu à un mouvement stable, ce qui correspond à une structure concentrique des variétés associées dans l'espace des phases. Ces variétés représentent des barrières imperméables pour le flot classique et confinent la dynamique stable dans des régions bornées de l'espace des phases. Elles sont en général désignées comme **tores** - ou **courbes invariantes** ("invariant tori, - curves") et leur existence est rigoureusement garantie par le théorème de Kolmogorov, Arnol'd et Moser ("KAM theorem") [48].

Au contraire, une trajectoire instable est caractérisée par une *expansion* du mouvement le long d'un des axes principaux et la dynamique n'est localement pas confinée à un volume fini de l'espace des phases. La direction suivant laquelle l'expansion se produit est associée à la **variété instable** de la trajectoire. Suite au théorème de Liouville, la dynamique doit être *contractive* le long la **variété stable** de la trajectoire.

Une accentuation de la non-linéarité de la dynamique, par exemple par l'augmentation de l'amplitude de la perturbation extérieure, provoque la destruction successive des tores invariants et aussi la diminution du volume d'espace des phases correspondant à une dynamique stable. La disparition des tores est décrite par le théorème de Birkhoff [47] et se produit sur une série infinie d'échelles, très similaire à la construction itérative d'un ensemble de Cantor [49]. A un stade intermédiaire de cette disparition, pendant laquelle la mesure des tores sera réduite de un à zéro, il en reste une courbe interrompue dont la perte d'imperméabilité pour le flot classique peut être caractérisée par le complément de sa mesure à l'unité [50]. Suite à leur parenté avec les ensembles de Cantor d'un côté et avec les tores invariants de l'autre, on appelle ces objets des **can-tor-es** ("cantori"). Leurs impact sur le transport classique et quantique a été le sujet d'un nombre considérable de publications [46, 51, 52, 53, 54, 55] et aura une certaine importance pour la suite du présent travail.

Nous avons jusqu'ici introduit les notions les plus importantes du côté de la dynamique classique non linéaire dont nous aurons besoin pour la compréhension de l'excitation de l'électron de Rydberg classique pendant son ionisation par un champ micro-onde. Comme notre intérêt principal porte sur la dynamique quantique, nous allons maintenant exposer dans quelle mesure ces notions restent pertinentes pour l'excitation des atomes réels.

Suite à la taille finie de \hbar , il est tout de suite évident que la mécanique quantique ne pourra pas distinguer par exemple entre un cantore et un tore invariant en-dessous de l'échelle imposée par cette limite. Un cantore qui est déjà perméable pour le flot classique peut donc ne pas l'être encore pour la densité de probabilité quantique. Cela induit, par rapport à la mécanique classique, une "mémoire" [43, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57] de la dynamique quantique de la structure de l'espace des phases à des valeurs différentes de la perturbation. Une association entre les propriétés de localisation de la fonction d'onde par exemple suivant le nombre quantique principal et des structures de l'espace des phases à une valeur de la perturbation donnée ne peut donc être effectuée qu'en connaissant l'histoire de la structure de la région de l'espace des phases au voisinage de l'état initial de l'atome. Cette histoire de la structure classique sera à identifier avec la **dynamique de niveaux** (évolution des niveaux d'énergie avec un paramètre externe, comme le champ extérieur) du spectre quantique.

Notons que ce besoin est une caractéristique particulière des systèmes avec une dynamique *mixte* ayant un espace des phases divisé en régions régulières et irrégulières. Dans le cas d'une dynamique entièrement irrégulière (indépendamment de la perturbation, "hard chaos") [45, 58], l'identification de certaines orbites classiques (instables) avec des structures de la fonction d'onde à une valeur de la perturbation donnée n'a pas besoin d'une justification par l'évolution des états propres en fonction des paramètres externes. L'inexistence de structures stables dans ce dernier cas a ainsi permis l'introduction de la notion des **cicatrices** ("scars") des fonctions d'onde le long des *orbites périodiques instables* [59]. Ce terme décrit une amplitude accentuée de la densité de probabilité quantique

le long de ces orbites classiques, dans l'espace de configuration ainsi que dans l'espace des phases. Certains auteurs ont essayé de transposer cette notion aux systèmes avec un espace des phases mixte, entre autres au problème micro-onde [10, 36, 37].

Une telle approche sera discutée dans les paragraphes 5.7.2 et 6.2.4. En accord avec la terminologie utilisée dans la littérature, nous parlerons simplement de "cicatrices" pour désigner des fonctions d'onde qui exhibent cette propriété. Nous allons étudier l'excitation des cicatrices pendant le processus d'ionisation et évaluer la pertinence de ce concept pour la compréhension des résultats expérimentaux, en comparaison avec des approches semiclassiques fondées sur une analyse de la dynamique des niveaux et des structures classiques associées.

Ayant achevé notre exposé des concepts les plus importants pour la suite de ce travail, nous finissons cette introduction par un bref résumé de la situation expérimentale dans le domaine micro-onde, telle qu'elle se présente aujourd'hui. Nous ne tenons compte que des expériences avec une motivation issue de la dynamique non-linéaire [8, 10, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 44] ou de la localisation dynamique et laissons de côté les études se limitant à une approche multiphotonique traditionnelle [60].

1.2 Expériences sur l'excitation et l'ionisation des atomes de Rydberg par un champ micro-onde

Nous avons déjà mentionné qu'il s'agit avec les états de Rydberg exposés à un champ micro-onde d'un des trois systèmes "prototypes" pour l'étude du chaos quantique en physique atomique. Comme pour les atomes excités dans un champ statique magnétique intense [61, 62, 63, 64, 65, 66] ou dans des champs statiques électrique et magnétique croisés [67, 68], la nonlinéarité des équations classiques dépend ici de manière continue du rapport entre la perturbation externe et le champ atomique. Au contraire, les atomes à deux électrons et notamment les états doublement excités de l'hélium [69] représentent un problème avec une nonlinéarité intrinsèque, en absence de toute perturbation extérieure. C'est d'ailleurs ce dernier système qui se trouve à l'origine de la mécanique classique non-linéaire, ainsi que d'une remarque due à Einstein datant de l'année 1917 [70] concernant la quantification de cette classe des systèmes classiques, qui est devenue une des motivations du "chaos quantique" de nos jours.

Les atomes excités dans un champ magnétique et dans des champs croisés, ainsi que les états doublement excités, sont décrits par un hamiltonien *indépendant* du temps. L'énergie est une quantité conservée et les états propres du problème quantique sont donc stationnaires. La manière adéquate de tester les prédictions théoriques sur les "signatures quantiques du chaos" [71] est alors la spectroscopie conventionnelle. L'exploitation du spectre du système fortement per-

turbé sur une gamme de paramètres suffisamment large permet - en principe - la comparaison immédiate d'une vaste variété de phénomènes prédit par la théorie avec le résultat expérimental.

Suite à la dépendance temporelle explicite de l'hamiltonien décrivant le problème micro-onde, l'énergie n'est plus conservée, et les états propres de l'atome dans le champ ne sont stationnaires que dans un espace de Hilbert élargi par la coordonnée de temps. Par conséquent, la spectroscopie traditionnelle ne s'applique pas à ce problème non stationnaire et des tests immédiats, par exemple des prédictions de la théorie des matrices aléatoires à propos des caractéristiques spectrales, sont de loin moins évidents [41] que dans le domaine des systèmes autonomes. On est plutôt conduit à s'intéresser aux propriétés typiques de transport d'énergie quantique, notamment quand les paramètres caractérisant le champ externe correspondent à une diffusion non bornée de l'électron classique suivant l'action, en contraste avec la localisation dynamique de la fonction d'onde quantique.

Deux approches complémentaires permettent de conclure sur le transport quantique:

- La mesure de la redistribution de la population de l'état initial après un certain temps d'interaction avec la micro-onde, à une amplitude de la micro-onde qui induit ou qui n'induit pas encore l'ionisation des atomes ou d'une fraction d'entre eux pendant le temps expérimental.
- La mesure du seuil d'ionisation, c'est-à-dire de l'amplitude de la micro-onde qui engendre un certain taux d'ionisation des atomes ayant été préparés dans un état initial et ayant interagi avec le champ pendant un temps d'interaction bien défini.

De toute évidence, la première approche peut apporter des informations beaucoup plus détaillées sur le processus d'ionisation et sur le transport quantique, mais elle demande aussi un effort expérimental beaucoup plus important. Il y a jusqu'ici en tout trois expériences qui étudient la localisation dynamique pendant l'excitation et l'ionisation des atomes de Rydberg par micro-onde, dont deux utilisant des atomes de Rydberg d'hydrogène et une travaillant sur des états excités du rubidium:

- L'expérience de Peter Koch et al. à Stony Brook [10, 24, 28, 29, 30] a jusqu'ici fourni le nombre le plus important de données expérimentales. Depuis le début des années quatre-vingt, ces auteurs ont étudié l'ionisation des états de Rydberg de l'hydrogène de nombre quantique principal environ 60, dans des cavités micro-onde de fréquence de ca. 9 GHz à ca. 36 GHz. A partir des mesures exclusivement du seuil d'ionisation, ces auteurs ont fourni des évidences indirectes pour l'existence de la localisation dynamique. De plus, ils observent des structures locales du seuil d'ionisation en fonction de la fréquence du champ qu'ils associent à la population de certaines fonctions d'onde individuelles, celles-ci montrant des "cicatrices", c'est-à-dire des amplitudes maximales ou minimales le long de certaines orbites périodiques instables dans l'espace des phases classique. Un inconvénient notable

de ces expériences est que l'état initial dans lequel les atomes sont préparés n'est pas bien défini, sauf pour le nombre quantique principal. Les auteurs le caractérisent comme une distribution microcanonique des nombres quantiques du moment cinétique et de sa projection sur l'axe de quantification, sur la couche d'énergie définie par le nombre quantique principal. Un autre désavantage est la grande vitesse des atomes d'hydrogène, ce qui exclut un changement systématique du temps d'interaction (égal à environ 300 cycles de la perturbation). A cause du grand nombre de données, ce sera cette série d'expériences qui nous guidera pendant nos simulations numériques.

- L'expérience de Jim Bayfield et al. à Pittsburgh [8, 9, 26, 27] utilisant aussi de l'hydrogène, a l'avantage considérable d'un état initial bien défini (état parabolique extrémal) et d'un choix libre de la fréquence de la micro-onde, car il utilise un guide micro-onde au lieu d'une cavité. Ces auteurs ont fourni d'autres mesures du seuil d'ionisation, qui, elles aussi, supportent la théorie de la localisation dynamique. Les valeurs du nombre quantique principal sont comparables à celles de l'expérience de Koch et al. [10, 28]. Ils ont été de plus les premiers à aborder une analyse de la redistribution de la population des états liés par la micro-onde. Le prix à payer pour l'utilisation d'un guide micro-onde consistait à l'époque en un contrôle plus difficile du bruit résiduel large bande autour du signal cohérent de la micro-onde, ce qui peut être critique pour l'observation de la localisation dynamique ainsi que des "cicatrices" prétendues de Koch et al., car il s'agit là de phénomènes qui dépendent sensiblement de la cohérence de la micro-onde, comme ces auteurs l'ont démontré eux-mêmes pour la première fois. Suite à la géométrie expérimentale, au petit diamètre du guide d'onde et à la vitesse des atomes d'hydrogène, le temps d'interaction des atomes avec la micro-onde ne vaut que ca. 100 périodes du champ. Cela a certaines conséquences pour la comparaison des résultats avec la dynamique classique, car il est proche du temps d'ionisation classique de l'électron de Rydberg. Un autre inconvénient est la présence d'un faible champ électrique statique dans la zone d'interaction (utilisé pour la stabilisation des états paraboliques) qui doit en principe être considéré pour une comparaison détaillée du résultat expérimental avec la dynamique classique. Nous reviendrons sur ces expériences dans le paragraphe 6.2.4.
- L'expérience de Herbert Walther et al. à Garching, [25, 31, 32, 44] qui étudie l'ionisation des atomes de Rydberg de rubidium, préparés dans un état initial de faible moment cinétique, ont mis en évidence la pertinence de la notion de la localisation dynamique non seulement pour les états de Rydberg de l'hydrogène, mais aussi pour d'autres espèces atomiques à un seul électron de valence. Ce sont les premières expériences qui ont fourni une démonstration qualitative directe de l'effet, par l'analyse systématique de la redistribution de la population de l'état initial sur les états liés, en fonction du temps d'interaction des atomes avec la micro-onde. Des mesures complémentaires sur le seuil d'ionisation ont donné des résultats comparables

aux expériences sur l'hydrogène. Ces expériences ont aussi testé l'hypothèse du découplage effectif du continuum dans le régime de la localisation dynamique, qui était à la base des premières modèles théoriques. Le désavantage majeur des expériences sur le rubidium est qu'on ne dispose pas d'un modèle univoque de la dynamique classique. Leur interprétation doit donc être entièrement appuyée sur des considérations quantiques. Nous nous y référons seulement quand nous discuterons le couplage effectif au continuum (voir paragraphe 5.6).

Chapitre 2

Stabilisation dans un champ laser

Pour finir cette introduction générale, revoyons brièvement les divers mécanismes de stabilisation dans le domaine optique. Dans les conditions d'une structure atomique fortement distordue par le champ laser, plusieurs phénomènes de stabilisation ont été prédits ou observés. D'origines *certainement différentes*, ils ont reçu des dénominations malheureusement très proches, ce qui a engendré une confusion de terminologie notable dans la littérature, au-delà de la confusion due à la nature compliquée du problème physique. On rencontre ainsi la "stabilisation adiabatique" [72] ("adiabatic stabilisation"), la "stabilisation dynamique" [73, 74, 75] ("dynamical stabilization") et la "stabilisation classique" [76, 77, 78, 79] ("classical stabilisation"), dont les deux premières sont assez souvent (et *incorrectement*) expliquées par la "localisation dichotomique" [80] ou "polytomique" [81, 82, 83] ("dichotomic localisation", "polytomic localisation") de la fonction d'onde électronique. Exceptée une variante transitoire [84, 85] due à la création de paquets d'onde de Rydberg et représentant un effet de courte durée, tous ces effets de "stabilisation" attendent leur réalisation expérimentale.

Initialement, "stabilisation" [86, 87] (tout court) traduisait l'*augmentation* de la durée de vie d'un atome d'hydrogène faiblement excité avec l'intensité *montante* du champ de laser, une fois dépassé le régime perturbatif (où la durée de vie *décroit* quand on augmente l'intensité). L'atome est censé manifester un taux de décroissance réduit seulement *en présence* du laser intense, ce qui permettrait la réalisation d'expériences sur un objet extrêmement exotique et de longue durée de vie constitué par l'atome *et* le laser. Comme ce phénomène (à part sa réalisabilité expérimentale) n'implique *aucune* propriété de l'enveloppe de l'impulsion de laser et comme il a été prédit sur la base de calculs de type "Floquet" [86, 87] (nous verrons plus tard la signification exacte de ce terme, il est suffisant pour le moment de remarquer qu'il implique une amplitude constante du champ), il a été (re)baptisé du nom de "stabilisation adiabatique" [72], pour le distinguer d'autres phénomènes de stabilisation prédits sous certaines hypothèses additionnelles sur l'impulsion de champ externe.

Ce sont ces derniers mécanismes qui ont été regroupés sous le nom de "stabi-

lisation dynamique” [73, 74, 75], ce qui sous-entend des transitions dynamiques (induites par l’enveloppe de l’amplitude du champ) entre les différents niveaux propres du complexe atome-champ. De telles transitions donneraient lieu à la population de niveaux hautement excités de grandes valeurs du moment cinétique ainsi qu’à la création de paquets d’onde. La population piégée dans les états de ℓ élevé [84] ou dans les paquets d’onde n’approchant le noyau que pendant une petite fraction de leur période orbitale [85], serait donc relativement stable vis-à-vis de l’ionisation par le champ externe, ce qui donne lieu à un effet de stabilisation (dont la durée est pourtant limitée par l’échelle de temps caractéristique pour la dispersion d’un paquet d’onde ou du mélange d’états suivant ℓ).

Conceptuellement, la stabilisation adiabatique est soumise à un plus petit nombre de contraintes sur les paramètres externes ou internes. Elle se prête donc le mieux à un premier essai d’établir le lien avec le domaine micro-onde, ce que nous ferons dans le paragraphe 6.3.

Les stabilisations adiabatique et dynamique étant des effets issus des études quantiques, il reste à mentionner des approches classiques au problème [76, 77, 78, 79, 88, 89, 90, 91]. Celles-ci sont largement motivées par le fait qu’une compréhension qualitative qui puisse convaincre, ou un argument rigoureux expliquant l’origine des deux mécanismes quantiques exposés ci-dessus reste toujours inachevés. Elles étaient proposées soit pour identifier une origine possiblement classique du phénomène [77, 78, 89], soit pour y appliquer des notions issues de l’analyse des systèmes classiques irréguliers [76, 79, 88, 90, 91], qui se sont relevées très utiles dans la compréhension de l’interaction d’états de Rydberg avec un champ micro-onde [7]. Néanmoins, une bonne partie de ces études prévoit des effets de stabilisation qui sont encore à *distinguer* de la “stabilisation adiabatique”. Cela est probablement le mieux souligné par le fait qu’ils ne prévoient pas de stabilisation [79, 92] justement dans ce régime de fréquence et d’intensité du champ où des calculs quantiques “exacts” suggèrent son existence. On se retrouve donc ici *a priori* avec une troisième famille d’effets de stabilisation que nous noterons “stabilisation classique” [76] et dont la pertinence dans le monde quantique reste à éclaircir.

Remarquons enfin que la démarche d’une application des connaissances accumulées dans l’analyse des signatures quantiques des systèmes classiquement irréguliers (qui a été popularisé sous le nom “chaos quantique” (“quantum chaos”) ou “chaologie quantique” (“quantum chaology”)) [93] nous semble très prometteuse, vu le succès important de ces méthodes dans la compréhension des systèmes qui étaient considérés comme trop “complexes” du point de vue de la mécanique quantique traditionnelle et donc au-delà de l’intérêt d’une bonne partie de la communauté de physique atomique, jusqu’il n’y a pas très longtemps. Évoquons ici notamment l’atome d’hydrogène excité dans un champ magnétique statique intense [94, 95, 96], les atomes de Rydberg dans des champs statiques électriques et magnétiques croisés [67, 68], ainsi que les atomes à deux électrons [69] et, enfin, les atomes de Rydberg dans un champ micro-onde [7, 9, 24, 25, 33, 34, 35, 36]. Notons aussi les fluctuations d’Ericson [97] observées dans les résonances des noyaux

composés qui sont à l'origine de toute une partie très importante de ce domaine, des matrices aléatoires (“random matrix theory”, “RMT”) [19] d'un côté et de la théorie de la diffusion chaotique (“chaotic scattering”) [98] de l'autre côté.

Deuxième partie
Fondement théorique

Eine Wirkung völlig zu hindern, dazu gehört eine Kraft, die der Ursache von jener gleich ist, aber ihr eine andere Richtung zu geben bedarf es öfters nur einer Kleinigkeit.

Georg Christoph Lichtenberg, *Sudelbücher*.

Dans cette partie, nous allons introduire les outils théoriques dont nous aurons besoin pendant notre étude de l'ionisation d'un atome d'hydrogène par un champ électromagnétique oscillant.

Dans une première partie, nous allons revoir les propriétés principales de la dynamique classique de ce système, dans la mesure où elles auront de l'importance pour la compréhension de l'ionisation de l'atome quantique.

Cela sera suivi de l'exposé de l'approche quantique que nous avons développé pour modéliser le système réel et qui ne contient *aucune* approximation sur la singularité Coulombienne, ni sur le spectre continu de l'atome.

Chapitre 3

Dynamique classique

Nous avons vu dans l'introduction (cf. 1.1) que la motivation pour l'étude de l'excitation d'un atome de Rydberg par un champ micro-onde réside dans la comparaison des dynamiques classique et quantique du problème.

On ne constate pas seulement la signature de la dynamique classique par le comportement de seuil du signal d'ionisation avec l'amplitude, mais au-delà par l'obéissance de ce seuil à une loi d'échelle. Ces observations suggèrent une comparaison plus détaillée de l'excitation quantique avec le transport classique, pendant l'ionisation de l'atome par le champ, notamment à l'égard de l'impact des barrières partielles de l'espace des phases classique mixte (partiellement régulier et partiellement irrégulier) pour le transport de la probabilité quantique.

Dans cette section, nous fournissons les moyens pour une telle comparaison. Nous allons d'abord revoir les équations du mouvement classique qui nous serviront plus tard à quelques simulations classiques, à comparer avec la dynamique quantique. Nous évoquons ensuite les lois d'échelles des équations classiques et définissons les variables réduites qui seront largement utilisées pour la caractérisation des différentes situations physiques dans la suite de ce mémoire. Enfin nous allons définir les variables action-angle canoniques engendrant l'espace des phases classique, dont nous nous servirons dans le chapitre 5.7.2, pour une comparaison détaillée du transport classique avec l'excitation quantique.

Ici et pendant la suite de ce chapitre, nous utilisons les unités atomiques, ce qui correspond à poser

$$m = |q| = \hbar = 4\pi\epsilon_0 \equiv 1,$$

où m désigne la masse réduite du système électron-proton. Nous aurons besoin des valeurs explicites de l'unité atomique t_{ua} du temps, F_{ua} du champ électrique et ω_{ua} de la pulsation, qui sont données par

$$\begin{cases} t_{ua} = 2.42 \times 10^{-17} \text{ s} \\ F_{ua} = 5.14 \times 10^9 \text{ V/cm} \\ \omega_{ua} = 4.13 \times 10^{16} \text{ Hz} \end{cases} \quad (3.1)$$

Ces quantités caractérisent un électron sur la première orbite de Bohr (respectivement $1/2\pi$ fois la période de révolution de l'électron, le champ Coulombien du noyau et la pulsation du mouvement de l'électron).

3.1 Équations du mouvement classiques

Nous décrivons l'interaction entre un électron atomique et un champ électromagnétique oscillant de polarisation linéaire et défini par le potentiel vecteur \mathbf{A} dans la jauge de vitesse.

Dans le référentiel du centre de masse de l'électron et du noyau atomique (dont le mouvement est séparable [66]), et en l'absence d'effets relativistes, la fonction de Hamilton s'écrit, en coordonnées cylindriques:

$$H = \frac{1}{2}(\mathbf{p} + \mathbf{A})^2 - \frac{1}{(\rho^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}} + \frac{\ell_z^2}{2\rho^2}. \quad (3.2)$$

Le signe positif de \mathbf{A} est une conséquence de la charge *négative* de l'électron, dont le moment cinétique le long de \hat{z} est désigné par ℓ_z .

Nous allons nous restreindre essentiellement à une analyse unidimensionnelle de la dynamique classique (avec \hat{z} l'axe de polarisation du champ) et réduisons alors (3.2) à sa version unidimensionnelle:

$$H = \frac{1}{2}(p_z + A)^2 - \frac{1}{|z|} = H_0 + p_z A + \frac{A^2}{2}, \quad (3.3)$$

avec

$$H_0 = \frac{p_z^2}{2} - \frac{1}{|z|}, \quad (3.4)$$

où H_0 représente la partie non-perturbée de H .

Les équations classiques se déduisent de (3.3) par les équations de Hamilton

$$\frac{dz}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_z}, \quad \frac{dp_z}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial z}. \quad (3.5)$$

On voit tout de suite que la singularité Coulombienne induit une divergence de dp_z/dt à l'origine. Ce problème peut être contourné [66] par l'introduction des variables semiparaboliques u et p_u

$$u = (2z)^{1/2}, \quad p_u = up_z, \quad (3.6)$$

ainsi que le "temps oscillateur" τ

$$dt = u^2 d\tau = 2z d\tau. \quad (3.7)$$

Le temps oscillateur ne s'écoule pas de façon homogène mais d'autant plus lentement que l'électron est loin du noyau. Cela permet la régularisation de la singularité Coulombienne, comme nous le voyons tout de suite: On réécrit la fonction de Hamilton dans les nouvelles coordonnées

$$H = H_0 + \frac{1}{2}A^2 + \frac{p_u}{u}A, \quad (3.8)$$

avec

$$H_0 = \frac{p_u^2 - 4}{2u^2}, \quad (3.9)$$

et déduit les équations du mouvement, avec (3.5)-(3.7):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{du}{d\tau} = p_u + uA, \\ \frac{dp_u}{d\tau} = 2uH - p_u A - uA^2. \\ \frac{dt}{d\tau} = u^2, \\ \frac{dH}{d\tau} = (Au^2 + p_u u) \frac{dA}{dt}, \end{array} \right. \quad (3.10)$$

où H est donné, à chaque instant, par (3.8). (3.10) ne représente donc que *trois* équations indépendantes, H n'étant qu'un intermédiaire de calcul commode qui régularise tout. Grâce aux transformations (3.6) et (3.7), il ne reste en effet plus de singularité des équations du mouvement classiques. De plus, (3.10) se réduit aux équations d'un oscillateur harmonique de pulsation $\sqrt{-2H_0}$ quand A est nul et alors à une dynamique très simple car parfaitement connue. En fait, la raison profonde de cette simplicité ainsi que de l'aspect un peu "magique" des transformations (3.6) et (3.7), réside dans le fait que l'atome d'hydrogène 1D et l'oscillateur harmonique partagent le même groupe dynamique $SO(2,1)$.

Pour obtenir la forme finale des équations qui permettra une étude numérique de la dynamique classique, il reste donner une expression explicite de A . Dans l'approximation dipolaire [99] le champ électromagnétique \mathcal{F} est donné par $\mathcal{F}(t) = F \cos(\omega t)$, ce qui implique,

$$A = -\frac{F}{\omega} \sin(\omega t). \quad (3.11)$$

Reporter (3.11) dans (3.10) fournit

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{du}{d\tau} = p_u - u \frac{F}{\omega} \sin(\omega t), \\ \frac{dp_u}{d\tau} = 2uH + p_u \frac{F}{\omega} \sin(\omega t) - \frac{F^2}{\omega^2} u \sin^2(\omega t), \\ \frac{dt}{d\tau} = u^2, \\ \frac{dH}{d\tau} = \left[\frac{F}{\omega} u^2 \sin(\omega t) - p_u u \right] F \cos(\omega t). \end{array} \right. \quad (3.12)$$

En jauge de longueur, les équations du mouvement s'obtiennent de manière tout-à-fait analogue. La fonction de Hamilton dans cette jauge est donnée par

$$H = \frac{1}{2}p_z^2 - \frac{1}{z} + Fz \cos(\omega t), \quad (3.13)$$

et en coordonnées semiparaboliques:

$$H = \frac{1}{2}\left(\frac{p_u}{u}\right)^2 - \frac{2}{u^2} + \frac{1}{2}Fu^2 \cos(\omega t). \quad (3.14)$$

On obtient des équations qui sont différentes de (3.12) mais qui décrivent les mêmes trajectoires:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{du}{d\tau} = p_u, \\ \frac{dp_u}{d\tau} = 2u(H + Fu^2 \cos(\omega t)), \\ \frac{dt}{d\tau} = u^2, \\ \frac{dH}{d\tau} = \frac{1}{2}\omega Fu^2 \sin(\omega t). \end{array} \right. \quad (3.15)$$

Pour l'étude de la dynamique classique, le choix entre (3.12) et (3.15) est une affaire de convenance.

3.2 Lois d'échelles

Les forces qui interviennent dans les fonctions de Hamilton (3.13) et (3.8) décrivant notre problème physique sont des fonctions homogènes de la position de l'électron. Par conséquent, la dynamique classique doit être *strictement* invariante sous certaines transformations d'échelles des différentes variables qui interviennent.

Ces transformations d'échelles peuvent être déduites par la multiplication par exemple de la fonction de Hamilton (3.15) par un scalaire λ . On récrit

$$\lambda H = \frac{p_u^2 - 4}{2(\lambda^{-1/2}u)^2} - \frac{1}{2}(\lambda^{-1/2}u)\lambda^2 F \cos(\omega t). \quad (3.16)$$

On en déduit, avec (3.15) et (3.6), que les équations du mouvement classiques

sont invariantes lors de la transformation suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} H \rightarrow \lambda H, \\ \tau \rightarrow \lambda^{-1/2} \tau, \\ t \rightarrow \lambda^{-3/2} t, \\ u \rightarrow \lambda^{-1/2} u, \\ p_u \rightarrow p_u, \\ z \rightarrow \lambda^{-1} z, \\ p_z \rightarrow \lambda^{1/2} p_z, \\ F \rightarrow \lambda^2 F, \\ \omega \rightarrow \lambda^{3/2} \omega. \end{array} \right. \quad (3.17)$$

La dynamique classique de l'électron dans un champ électromagnétique oscillant est ainsi entièrement décrite par le rapport

$$\beta = \frac{F}{\omega^{\frac{4}{3}}} \quad (3.18)$$

qui est indépendant de λ . Pourtant, fixer la valeur de β revient à comparer la dynamique pour toutes les valeurs de l'énergie qui dépend de λ , comme on le voit dans (3.17).

Pour une comparaison à la dynamique quantique, il s'est révélé plus commode de fixer l'énergie initiale (donnée par le nombre quantique principal n_0) et d'étudier la dynamique à différentes valeurs de F et de ω . Le choix naturel de λ est donc $\lambda = -1/2H_0 = n_0^2$. La dynamique classique d'un électron lié par un potentiel Coulombien et soumis à un champ oscillant est donc *strictement* invariante sous les transformations (3.17), pour n'importe quelle valeur de λ .

En fixant dans une expérience réelle ou numérique les valeurs des paramètres "réduits"

$$\left\{ \begin{array}{l} F_0 = n_0^4 F, \\ \omega_0 = n_0^3 \omega, \\ t_0 = n_0^{-3} t, \end{array} \right. \quad (3.19)$$

qui mesurent, respectivement, l'amplitude, la pulsation et la durée du champ externe par rapport au champ Coulombien, à la fréquence de Kepler et à la durée d'une révolution sur l'orbite classique non perturbée de l'électron, on définit donc entièrement la dynamique classique de notre système. Ce résultat est essentiel pour l'interprétation d'une grande partie des expériences réelles et numériques qui ont été réalisées dans ce domaine.

Notons encore qu'en mécanique quantique, on n'a plus de lois d'échelle, à cause de la définition de l'action $I = \oint p_z dz$ qui n'est pas invariante par l'équation (3.17). Par conséquent, toute observation d'une obéissance des résultats expérimentaux à une loi d'échelle comme elle est formulée dans (3.17) suggère une interprétation *classique* de tels résultats [7, 10, 100].

3.3 Les variables action-angle

Notre intérêt principal pour la dynamique classique d'un électron atomique dans un champ électromagnétique intense provient de la comparaison des aspects locaux des propriétés de transport quantique et classique.

Nous avons vu déjà au chapitre 1.1.2 que nous envisageons ici un système physique dont l'espace des phases sera en général sous-divisé en régions régulières et irrégulières, avec un poids relatif déterminé par l'amplitude de la perturbation extérieure. Un outil très efficace pour visualiser ces structures plus ou moins compliquées sont les **sections de Poincaré** ("Poincaré (surface of) section") de l'espace des phases et les **applications de Poincaré** ("Poincaré maps") associées [47, 48].

L'idée principale consiste à identifier une trajectoire par ses intersections consécutives avec une surface bidimensionnelle qui a été astucieusement choisie dans l'espace des phases. La suite des intersections d'une trajectoire individuelle avec cette section de Poincaré est décrite par l'application de Poincaré qui n'est rien d'autre qu'une discrétisation de la dynamique hamiltonienne dans tout l'espace des phases. La figure 3.1 illustre cette discrétisation.

Dans notre étude de la dynamique d'un atome unidimensionnel dans un champ oscillant, nous avons deux degrés de liberté de la dynamique (3.12), (3.15), avec la contrainte (3.8), ce qui confine le mouvement dans un sous-espace tridimensionnel de l'espace des phases. La section de Poincaré sera donc définie par un plan, par exemple en fixant la phase du champ micro-onde dans l'espace des phases accessible. Le plan sera engendré par une paire de coordonnées canoniquement conjuguées Q, P (par exemple (z, p_z) ou (u, p_u)).

Les sous-variétés unidimensionnelles du plan de section qui sont invariantes sous l'application de Poincaré définissent les trajectoires régulières car elles indiquent la présence d'une intégrale du mouvement supplémentaire par la réduction de la dimension de l'espace accessible. Elles forment des courbes invariantes qui ne peuvent pas avoir d'intersections entre elles, suite à l'unicité des solutions des équations de Hamilton. Si la dynamique considérée est globalement régulière, la section de Poincaré est entièrement remplie de telles courbes invariantes.

Néanmoins, dans le cas d'un système hamiltonien générique, on a un espace des phases mixte, c'est-à-dire des régions de dynamique régulière ainsi que de dynamique irrégulière. Les ensembles invariants sous l'application de Poincaré ne doivent alors plus être des sous-variétés du plan de section, mais peuvent en être des sous-ensembles bidimensionnels, représentant un mouvement "chaotique local" ou "global", suivant le cas où ces régions "stochastiques" de l'espace des phases sont bornées par des courbes invariantes (donc par des régions de dynamique régulière) ou non. Dans le cas d'un système globalement régulier qui est soumis à une perturbation extérieure, comme c'est le cas pour l'atome d'hydrogène dans un champ électromagnétique, on observe en général une transition continue d'une dynamique globalement régulière à une dynamique globalement chaotique, en passant par une dynamique mixte, en fonction de l'amplitude de la perturbation. Ceci s'exprime dans la section de Poincaré par l'apparition de

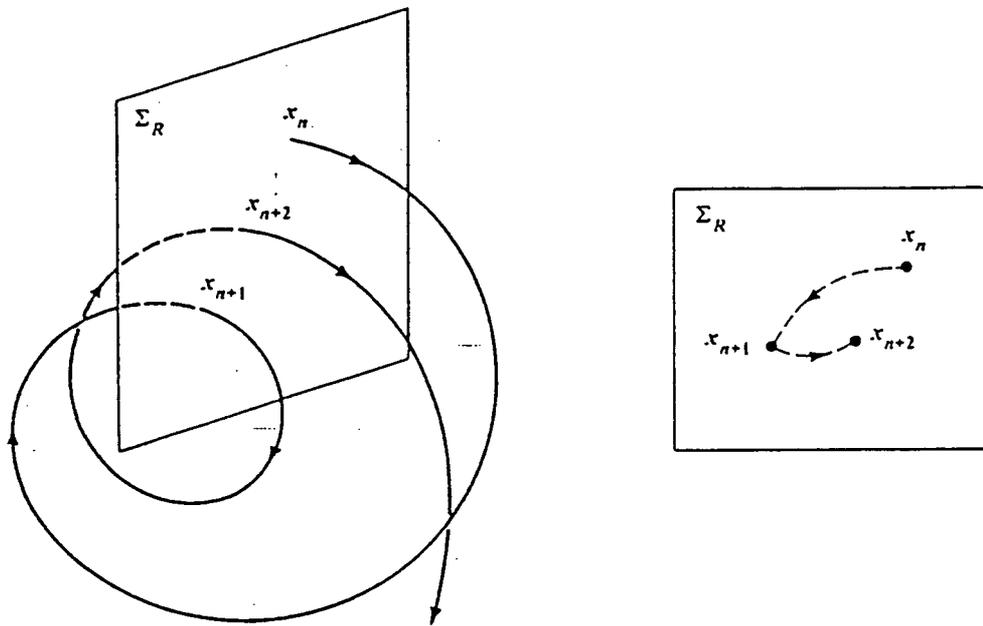


FIG. 3.1 - Discrétisation de la dynamique classique à l'aide d'une section de Poincaré. La figure est la figure 1.3 (a) de la référence [48]. L'application de Poincaré décrit la prolifération des intersections $\{x_n, x_{n+1}, x_{n+2}, \dots\}$ de la trajectoire avec la surface Σ_R .

regions stochastiques d'abord séparées par des courbes invariantes, qui finissent par remplir toute la section de Poincaré quand la perturbation est assez grande et la dynamique globalement chaotique. Pendant cette transition les courbes invariantes subissent une métamorphose compliquée; elles se déforment d'abord, puis elles deviennent poreuses en formant des cantores (cf. 1.1.2) et finalement elles disparaissent dans "la mer chaotique". Les trajectoires de dynamique globalement irrégulière représentent précisément les électrons qui seront ionisés par le champ micro-onde.

Dans l'étude présentée ici, nous fixons la phase ωt de la perturbation externe et définissons ainsi la section de Poincaré par le plan engendré par la coordonnée spatiale et l'impulsion conjuguée. Suite à la réduction de la dynamique (3.12), (3.15) à celle d'un oscillateur harmonique de fréquence $\sqrt{-2H_0}$ (cf. 3.1) nous utilisons les variables action-angle naturelles I, Θ de ce dernier, au lieu des variables u, p_u . Pour respecter l'invariance d'échelle (3.17) des équations classiques nous introduisons un paramètre continu α qui se relie au paramètre d'échelle λ de (3.17) par

$$\alpha = \lambda^{1/2} \quad (3.20)$$

et définissons I, Θ suivant [66]

$$\begin{cases} \frac{I}{\alpha} = \frac{1}{4} \left(\frac{u^2}{\alpha^2} + p_u^2 \right), \\ \Theta = 2 \arctan \frac{p_u \alpha}{u}. \end{cases} \quad (3.21)$$

Les relations inverses s'écrivent

$$\begin{cases} \frac{u}{\sqrt{\alpha}} = 2\sqrt{I} \cos \frac{\Theta}{2}, \\ p_u \sqrt{\alpha} = 2\sqrt{I} \sin \frac{\Theta}{2}. \end{cases} \quad (3.22)$$

Les deux paires d'équations impliquent une lois d'échelle pour I et Θ :

$$\begin{cases} I \rightarrow \lambda^{-1/2} I, \\ \Theta \rightarrow \Theta. \end{cases} \quad (3.23)$$

Bien que I et Θ représentent le choix naturel pour la visualisation de la dynamique dans l'espace des phases classique, l'identification avec des observables de la mécanique quantique n'est pas immédiate, à cause de l'absence d'un opérateur de phase.

Le lien naturel avec le problème quantique passe par l'introduction du groupe dynamique $SO(2, 1)$, dont les générateurs $S_1^{(\alpha)}, S_2^{(\alpha)}, S_3^{(\alpha)}$ sont simplement reliés à I et Θ . Pour une représentation $D_{k=1}^+$ [66], l'opérateur de Casimir \vec{S}^2 correspondant s'écrit

$$\vec{S}^2 = S_1^{(\alpha)2} + S_2^{(\alpha)2} - S_3^{(\alpha)2}.$$

Comme la représentation D_k^+ avec $k = 1$ implique $\vec{S}^2 = 0$, il s'en suit

$$S_3^{(\alpha)2} = S_1^{(\alpha)2} + S_2^{(\alpha)2}. \quad (3.24)$$

De manière consistante avec (3.24), on pose alors

$$\begin{cases} S_3^{(\alpha)} \equiv I, \\ S_1^{(\alpha)} \equiv I \cos \Theta, \\ S_2^{(\alpha)} \equiv I \sin \Theta, \end{cases} \quad (3.25)$$

ou encore :

$$\begin{cases} u^2 = 2\alpha(S_3^{(\alpha)} + S_1^{(\alpha)}), \\ p_u^2 = \frac{2}{\alpha}(S_3^{(\alpha)} - S_1^{(\alpha)}). \end{cases} \quad (3.26)$$

A un stade plus avancé de ce mémoire (cf. 5.7.1 et la figure 5.21), et en utilisant les équations (3.21) à (3.23), nous allons montrer quelques sections de Poincaré dans les variables I et Θ , après avoir intégré les équations de mouvement (3.12) ou (3.15).

Ici, nous voulons encore mentionner une singularité des équations de mouvement qui se manifestera de manière caractéristique dans les sections de Poincaré (cf. fig. 5.21) : Si nous choisissons comme conditions initiales pour l'intégration de (3.12)

$$\Theta = \pi, \quad \omega t = 0 \text{ et } I \neq 1,$$

(avec $\alpha = 1$ dans (3.21) et $\lambda = 1$ dans (3.17)) l'équation (3.22) fournit

$$p_u = 2\sqrt{I} \text{ et } u = 0,$$

ce qui implique la divergence de la partie non-perturbée H_0 de H dans (3.8)

$$H_0 = \frac{p_u^2 - 4}{2u^2} \rightarrow \infty$$

et donc la divergence de $dp_u/d\tau$ dans (3.12) et l'ionisation de l'électron atomique. Suite à $u = 0$, $dH/d\tau$ et $dt/d\tau$ s'annulent simultanément, et seulement $du/d\tau \stackrel{(3.12)}{=} p_u = 2\sqrt{I}$ prend une valeur finie. Si l'on choisissait, par contre, comme tout-à-l'heure $\Theta = \pi$ et $\omega t = 0$, mais $I = 1$, on déduit de (3.22)

$$p_u = 2 \text{ et } u = 0,$$

et dans (3.12)

$$\frac{du}{d\tau} = p_u \neq 0, \quad \frac{dp_u}{d\tau} = \frac{dH}{d\tau} = \frac{dt}{d\tau} = 0,$$

et l'électron ne s'ioniserait pas.

Nous nous sommes restreints ici à la dynamique unidimensionnelle d'un atome d'hydrogène dans un champ oscillant. La régularisation de la singularité Coulombienne par l'introduction des coordonnées semiparaboliques et le temps oscillateur peut être effectuée également dans le cas tridimensionnel et les équations sont de même type que dans le modèle unidimensionnel. Le point délicat est maintenant de caractériser les trajectoires obtenues dans un espace des phases à 6 dimensions. La section de Poincaré ne représente alors plus un outil aussi simple et performant que dans le modèle restreint à deux degrés de liberté. Notons cependant que l'étude de quelques trajectoires simples est instructive (cf. 6.2.3).

Chapitre 4

Dynamique quantique

Nous présentons maintenant la partie centrale de la théorie utilisée dans ce mémoire, à savoir la description “exacte” de l’ionisation d’un atome d’hydrogène par un champ électromagnétique de polarisation linéaire, dans des conditions hautement nonlinéaires.

Plus précisément, notre approche est particulièrement adaptée à l’excitation ou l’ionisation des atomes de Rydberg d’hydrogène par un champ de micro-onde, mais elle peut également être appliquée dans le domaine optique (cf. 6.3) [101].

Rappelons les caractéristiques essentielles qui déterminent la physique des états de Rydberg exposés à un champ micro-onde:

- Les intensités de micro-onde typiquement utilisées sont suffisamment grandes pour permettre un traitement classique du champ électromagnétique. Néanmoins, une interprétation des résultats numériques en termes du nombre de photons *échangés entre l’atome et le champ* reste possible.
- L’amplitude maximale de la perturbation est de l’ordre d’un dixième du champ Coulombien vu par l’électron de Rydberg sur son orbite non-perturbée. La symétrie Coulombienne de l’atome reste ainsi essentiellement intacte.
- La pulsation ω de la micro-onde est de l’ordre de l’écart d’énergie entre l’état initial n_0 de l’atome et l’état voisin ($n_0 \pm 1$), c’est-à-dire en unités réduites (3.19), $\omega_0 \simeq 1$.
- Le nombre N_0 de photons micro-onde nécessaire à l’ionisation de l’état initial de l’atome donné par

$$N_0 = \frac{n_0}{2\omega_0}, \quad (4.1)$$

est de l’ordre de dix à cent. Il s’agit d’une quantité strictement quantique qui n’obéit pas à une loi d’échelle classique du type (3.17). Les contributions des différents ordres de photons dans un développement perturbatif de l’interaction sont comparables. La situation physique est donc une situation hautement *non-perturbative*, qui ne se prête pas à une solution analytique.

- L’interaction des atomes avec la micro-onde est d’une durée de typiquement 100 à 1000 périodes du champ. Toute ionisation se produit sur la même échelle de temps. L’enveloppe de l’impulsion de micro-onde peut avoir un profil demi-sinusoidal ou plat, dans ce dernier cas avec des flancs montant et descendant dont la durée peut varier entre une dizaine et une centaine de cycles de la perturbation. Un cas typique est montré à la figure 4.1.

Donner une solution générale à ce problème difficile à *trois* degrés de liberté (deux degrés de liberté atomiques effectifs plus le temps), avec le couplage au continuum via les différents ordres multiphotoniques, représente un but relativement ambitieux.

Nous serons ainsi conduits à nous servir d’un mélange de différentes techniques permettant chacune la description “optimale” d’un des différents aspects à considérer, c’est-à-dire la symétrie Coulombienne de l’atome, l’interaction entre l’atome et le champ, et le couplage des états propres du système au continuum. Suite à l’ordre multiphotonique très élevé du processus d’ionisation, ainsi qu’aux nombres quantiques principaux très élevés, la simulation de l’excitation et de l’ionisation d’un atome de Rydberg par une micro-onde nécessitera l’utilisation des ordinateurs les plus puissants actuellement accessibles. Même avec une description “optimale” des différents composants de notre système, telle qu’elle sera présentée ici, nous nous trouvons ainsi dans une *situation limite* par rapport aux capacités disponibles.

Comme le temps d’interaction expérimental typique entre les atomes de Rydberg et la micro-onde est *long* par rapport à une période du champ, une intégration numérique de l’équation de Schrödinger est peu efficace pour la solution de notre problème. De plus, une telle approche ne permettrait pas l’accès direct aux propriétés spectrales et aux détails de la dynamique quantique de notre système, des informations qui seront d’intérêt pour la compréhension détaillée des résultats numériques. Nous serons alors conduits à réduire l’équation de Schrödinger à une équation aux valeurs propres “stationnaire”, dans un espace de Hilbert “étendu”. L’instrument dont nous nous servirons à cet égard est le théorème de Floquet [102, 103, 104, 105]. Ainsi nous arriverons à une représentation de l’Hamiltonien qui ne présente plus de dépendance temporelle explicite mais - en revanche - aura une dimension de plus par rapport aux dimensions spatiales habituelles. Comme nous nous contentons ici du cas d’une polarisation linéaire du champ externe, nous profitons de la symétrie cylindrique du problème et donc de la conservation de la composante L_z du moment cinétique de l’atome. Par conséquent, nous pouvons diagonaliser l’Hamiltonien dans un sous-espace de l’espace de Hilbert, défini par la valeur de L_z . Cela nous laisse avec une diagonalisation d’une matrice à trois degrés de liberté effectifs dont deux spatiaux et le troisième du à la périodicité temporelle de la perturbation.

Cette matrice sera représentée dans une base Sturmienne sphérique réelle, qui s’adapte très bien à la symétrie Coulombienne et permet notamment la prise en compte exacte de la singularité associée et du continuum atomique. Ainsi nous allons arriver à des expressions purement algébriques (et donc exactes) des

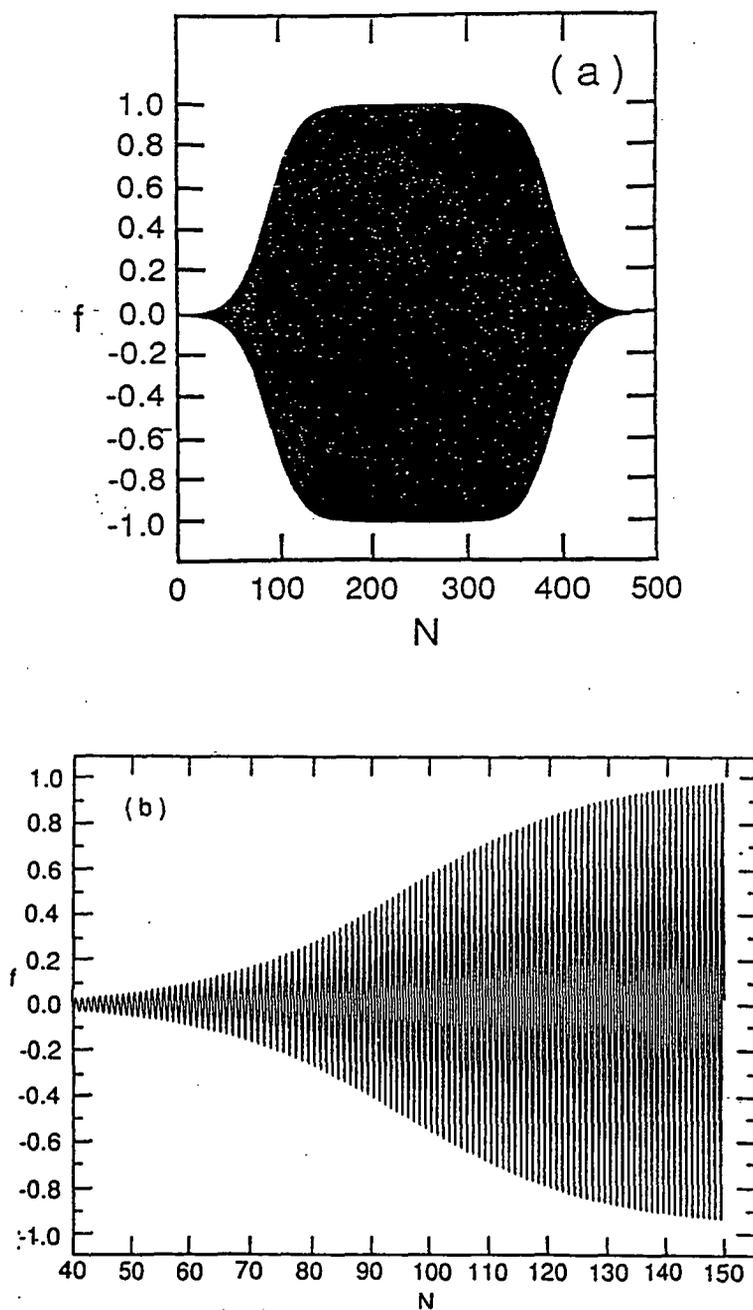


FIG. 4.1 - (a) Profil et (b) détail d'une impulsion de micro-onde typique [31] telle qu'elle est vue par les atomes de Rydberg exposés au champ.

éléments de matrice de notre Hamiltonien, qui obéiront à certaines règles de sélection. Ce dernier point représente un avantage majeur pour le traitement numérique du problème, car il permet la réduction du temps de calcul et de l'espace mémoire au minimum indispensable.

Lors de l'analyse des degrés de liberté atomiques nous allons aussi introduire quelques états atomiques dont les propriétés de symétrie se révéleront de grande importance pour le processus d'ionisation, comme nous le verrons pendant l'exposé des résultats numériques (cf. 6.2.2).

Une dilatation complexe de l'Hamiltonien nous servira enfin à une description explicite et transparente du couplage aux états du continuum et par conséquent du processus d'ionisation induit par le champ externe. L'opérateur de dilatation complexe, prolongement complexe de l'opérateur de dilatation habituel, sera explicitement représenté dans la base Sturmienne sphérique.

Appuyés sur cette représentation du système considéré, nous donnons ensuite une expression explicite de l'opérateur d'évolution temporelle à partir duquel le comportement de toutes les quantités d'intérêt expérimental et théorique peut être déduit. Nous utiliserons ce résultat pour le calcul de la probabilité d'ionisation et de la dynamique temporelle des fonctions d'onde du système complexe champ-atome. Les fonctions d'onde seront représentées par leurs densités de probabilité dans l'espace de configuration, ainsi que, pour le modèle unidimensionnel de l'atome d'hydrogène, par leurs projections sur l'espace des phases engendré par les variables canoniques I et Θ introduites dans le chapitre 3.3.

4.1 L'interaction entre atome et champ

Nous allons maintenant effectuer la réduction de l'équation de Schrödinger à une équation aux valeurs propres "stationnaire", à l'aide du théorème de Floquet [102, 103, 104, 105].

L'application de ce théorème nécessite la stricte périodicité de la perturbation, en particulier une amplitude *constante* du champ pendant toute la durée de l'interaction des atomes avec la micro-onde et néglige donc l'enveloppe de l'impulsion de micro-onde vue par les atomes (cf. figure 4.1). Ceci correspond à une projection *adiabatique* de l'état initial d'un atome sur les vecteurs propres du système et ne prend pas compte des transitions du type Landau-Zener [35, 106] induites par les flancs montant et descendant de l'impulsion. Pourtant, cette approximation n'affectera pas la généralité de nos conclusions dans les chapitres suivants (en particulier parce que le mélange des états induits par la dynamique non-linéaire est souvent prépondérant devant les transitions de Landau-Zener ; cf. 5, 6), et ne représente pas une limitation conceptuelle de la méthode. Il est en fait possible de construire, à partir du théorème de Floquet, des "bases instantanées", couplées par la variation de l'amplitude [106]. Les couplages n'étant en général pas très importants pour des impulsions longues et molles, nous allons les négliger dans nos calculs. Nous reviendrons sur ce point pendant la discussion des résultats de nos simulations (cf. 5.4.1, 5.5.4, 5.6.1, 5.7.3).

Écrivons d'abord l'hamiltonien de l'atome d'hydrogène soumis à un champ électromagnétique de polarisation linéaire. Nous employons la jauge de vitesse, comme pendant toute la suite de ce mémoire, car nous l'avons trouvée numériquement légèrement plus maniable que la jauge de longueur. En négligeant les effets relativistes ainsi que les effets de masse finie du noyau de l'atome, le Hamiltonien s'écrit en unités SI

$$H = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2}{2m} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} + qV(\mathbf{r}), \quad (4.2)$$

où $V(\mathbf{r})$ et $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ désignent les potentiels scalaire et vecteurs définissant le champ externe. En choisissant l'axe $\hat{\mathbf{z}}$ parallèle à l'axe de polarisation du champ, nous pouvons alors récrire l'Hamiltonien - dans l'approximation dipolaire avec (3.11) - comme:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{qFp_z \sin \omega t}{m\omega} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{q^2 F^2 \sin^2 \omega t}{2m\omega^2}. \quad (4.3)$$

Dans cette expression, F et ω représentent, respectivement, l'amplitude et la pulsation constante du champ extérieur. Le dernier terme dans l'Eq. (4.3) est un opérateur constant et peut être enlevé: sa valeur moyenne décrit le décalage pondéromoteur ("ponderomotive shift") [107], qui est l'énergie moyenne d'un électron libre dans un champ oscillant d'amplitude F et de fréquence ω . Le terme résiduel donne un facteur de phase sans importance physique. En unités atomiques ($m = |q| = 4\pi\epsilon_0 = \hbar \equiv 1$), le Hamiltonien se réduit alors à

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{Fp_z \sin \omega t}{\omega} - \frac{1}{r}. \quad (4.4)$$

Cela correspond à la fonction de Hamilton classique (3.2). Grâce à l'invariance rotationnelle de l'Eq. (4.4) autour de l'axe défini par le vecteur du champ, L_z , la projection du moment cinétique sur $\hat{\mathbf{z}}$, est une constante du mouvement. Par conséquent, tous les calculs présentés dans ce mémoire ont pu être réalisés dans un sous-espace bidimensionnel de l'espace de configuration à trois dimensions, avec une valeur prédéfinie du nombre quantique magnétique m .

Nous allons résoudre l'équation de Schrödinger correspondant à l'Eq. (4.4)

$$H|\psi(t)\rangle = i\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}. \quad (4.5)$$

pour une valeur fixe de l'amplitude F et donc pour un Hamiltonien périodique. La base "naturelle" pour l'analyse d'un tel système est donnée par les états de Floquet dont l'existence et le caractère complet sont garantis par le théorème du même nom [102, 103, 104, 105].

D'après le théorème de Floquet, toute solution de l'Eq. (4.5) peut être écrite comme combinaison linéaire de solutions "stationnaires" qui, elles, sont le produit d'une exponentielle oscillante et d'une fonction périodique:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i \exp(-i\varepsilon_i t) |\psi_i(t)\rangle, \quad (4.6)$$

avec:

$$|\psi_i(t + 2\pi/\omega)\rangle = |\psi_i(t)\rangle. \quad (4.7)$$

Les ε_i sont des quantités *réelles*. Ils s'appellent les "niveaux de quasiénergie" du système, avec les "états propres de Floquet" $|\psi_i(t)\rangle$, et sont l'analogie des états de Bloch électroniques dans un solide, définis par le théorème de Bloch [108, 109].

Ils peuvent être obtenus par la diagonalisation de l'opérateur:

$$\mathcal{H} = H - i\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{Fp_z \sin \omega t}{\omega} - \frac{1}{r} - i\frac{\partial}{\partial t} \quad (4.8)$$

agissant sur l'espace de Hilbert élargi (avec le temps comme dimension de plus) des fonctions périodiques de pulsation ω :

$$\mathcal{H}|\psi_i(t)\rangle = \varepsilon_i|\psi_i(t)\rangle. \quad (4.9)$$

Le spectre de \mathcal{H} est invariant par une translation de ω , les états propres correspondants représentant effectivement la même solution physique de l'équation de Schrödinger d'origine. Par la suite, nous allons nous restreindre à la considération des états propres dans une seule "zone de Floquet" de largeur ω , l'équivalent d'une zone de Brillouin en physique des solides [108]. Toutes les sommes portant sur les états de Floquet doivent donc être interprétées comme portant sur *une* zone de Floquet. Les états propres $|\psi_i(t)\rangle$ ($0 \leq t < 2\pi/\omega$) de \mathcal{H} forment une base orthonormée à chaque instant t :

$$\langle \psi_j(t) | \psi_i(t) \rangle = \delta_{ij}, \quad (4.10)$$

et satisfont la relation de fermeture suivante:

$$\sum_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)| = 1, \quad (4.11)$$

où la somme sur i porte sur une zone de Floquet.

Maintenant, nous pouvons éliminer la dépendance temporelle périodique des états de Floquet $|\psi_i(t)\rangle$ en introduisant leurs composantes de Fourier $|\psi_i^K\rangle$:

$$|\psi_i(t)\rangle = \sum_K e^{-iK\omega t} |\psi_i^K\rangle. \quad (4.12)$$

L'indice K compte le nombre de photons échangés entre l'atome et le champ et engendre le troisième degré de liberté du système dans la représentation matricielle de \mathcal{H} .

Cette interprétation de K est due à l'analogie étroite entre l'image de Floquet (issue d'un traitement *classique* du champ) et l'image des atomes habillés [110] où K désignerait le nombre de photons peuplant un certain mode du champ de radiation quantifié. K n'est donc en gros rien d'autre que l'indice désignant le nombre de photons de l'état habillé, avec un choix de l'énergie zéro égale à l'énergie du champ classique.

Suite à l'orthonormalité (4.10) des $|\psi_i(t)\rangle$, les $|\psi_i^K\rangle$ obéissent à

$$\sum_K \langle \psi_j^{K+\Delta K} | \psi_i^K \rangle = \delta_{ij} \delta_{\Delta K, 0}. \quad (4.13)$$

Ils peuvent être obtenus directement à partir de la diagonalisation numérique de \mathcal{H} . En fait, le terme périodique dans l'Eq. (4.8) montre une simple dépendance temporelle $\sin(\omega t)$ et ne couple donc que les composantes avec $\Delta K = \pm 1$. L'équation (4.9) est donc équivalente au système d'équations couplées suivant:

$$(\varepsilon_i + K\omega - H_0)|\psi_i^K\rangle = V|\psi_i^{K+1}\rangle - V|\psi_i^{K-1}\rangle, \quad (4.14)$$

avec

$$\begin{cases} H_0 = \frac{p^2}{2} - \frac{1}{r}, \\ V = -\frac{Fp_z}{2i\omega}, \end{cases} \quad (4.15)$$

H_0 désignant le Hamiltonien à champ zéro et V le couplage induit par le champ. A cause de (4.13), l'opérateur d'évolution temporelle de l'instant t_1 à l'instant t_2 s'écrit

$$U(t_1, t_2) = \sum_{i, K_1, K_2} e^{-i\varepsilon_i(t_2-t_1)/\hbar} e^{iK_1\omega t_1} e^{-iK_2\omega t_2} |\psi_i^{K_2}\rangle \langle \psi_i^{K_1}|. \quad (4.16)$$

4.2 La représentation des degrés de liberté atomiques

Nous venons maintenant à la représentation explicite de l'atome d'hydrogène tridimensionnel, y compris le continuum atomique. Dans cette section nous nous servirons de quelques notions de théorie des groupes qui ont été développées en détail dans la référence [66]. Par conséquent, nous nous contentons ici de n'en rappeler que quelques points clé d'intérêt immédiat pour nos besoins actuels.

Grâce à (4.16), toutes les propriétés se manifestant pendant l'évolution temporelle du système considéré peuvent en principe être exprimées à partir des quasiénergies ε_i et des états propres $|\psi_i^K\rangle$. Afin de résoudre les équations couplées (4.14), il faut encore choisir une base appropriée aux symétries primordiales du système considéré. C'est *ici* que nous faisons un choix en faveur du domaine micro-onde plutôt que du domaine optique, tels que nous les avons introduits dans l'introduction (cf. chapitres 1, 2). Dans ce dernier domaine, la dynamique est essentiellement celle d'un électron libre dans un potentiel oscillant qui est perturbé par le potentiel Coulombien, et on sera confronté à une symétrie plutôt cylindrique.

Dans le domaine micro-onde, l'amplitude réduite F_0 du champ (cf. (3.19)) est toujours plus petite que l'unité et la symétrie Coulombienne garde son caractère dominant. Comme la majeure partie du présent travail sera dévouée à l'analyse

de la dynamique quantique dans le régime des micro-ondes, nous choisissons une base qui s'adapte de manière optimale à cette symétrie.

Suite à sa propriété d'être la base d'une représentation linéaire du groupe dynamique $SO(4,2)$ du potentiel Coulombien, qui, elle, est une conséquence de l'équivalence du potentiel Coulombien avec un oscillateur harmonique, une base Sturmienne est parfaitement adéquate. Elle s'adapte à la symétrie interne du potentiel Coulombien et notamment à sa singularité à l'origine. Elle est une base *complète et discrète*, ce qui permet de reproduire les états liés aussi bien que les états du continuum de l'atome. Et finalement, tous les éléments de matrice possèdent des règles de sélection très fortes, ce qui implique que très peu d'éléments de la matrice à diagonaliser sont non nuls.

4.2.1 Éléments de matrice dans une base Sturmienne sphérique

Les fonctions Sturmiennes dépendent de deux nombres quantiques n et ℓ et d'un paramètre d'échelle α (le troisième nombre quantique m , étant un bon nombre quantique, peut être choisi comme constant). Elles s'expriment [111, 112] en coordonnées sphériques (r, ϑ, φ) suivant

$$S_{n\ell m}^\alpha(r, \vartheta, \varphi) = \left(\frac{(n - \ell - 1)!}{(n + \ell)!} \right)^{1/2} \left(\frac{2r}{\alpha} \right)^\ell e^{-r/\alpha} L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)} \left(\frac{2r}{\alpha} \right) Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi), \quad (4.17)$$

avec $|m| \leq \ell < n$, où les $L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}$ sont des polynômes de Legendre associés et les $Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$ les harmoniques sphériques habituelles. Si l'on pose $\alpha = n$, $S_{n\ell m}^\alpha$ coïncide avec la fonction propre hydrogénoïde habituelle, à un facteur constant près [66, 113]. Cela indique déjà a priori la parenté des fonctions Sturmiennes avec le problème Coulombien.

Pour toute valeur de α , la base engendrée par les fonctions Sturmiennes est complète mais pas orthonormée par rapport au produit scalaire conventionnel, cela étant le prix à payer pour son avantage pratique de représenter le continuum par une base discrète. Pour avoir aussi l'orthonormalité, il faut introduire un autre produit scalaire qui est défini par l'introduction d'un facteur $1/r$ entre les vecteurs à multiplier [66]. Cela se traduit par le fait que, dans la base Sturmienne (4.17), les équations couplées (4.14) ne correspondent plus (cf. (4.23), (4.24), (4.25) ci-dessous) à un problème aux valeurs propres habituel, mais plutôt à un problème aux valeurs propres généralisé de type

$$(\mathcal{A} - E_i \mathcal{B}) \cdot \mathbf{x}_i = 0, \quad (4.18)$$

où \mathcal{A} et \mathcal{B} sont deux matrices remplies par les éléments définis par (4.14) et multipliés de gauche par un facteur $2r$ (le facteur 2 n'étant qu'un choix de convenance pour l'identification formelle du potentiel Coulombien avec un oscillateur harmonique). Les E_i et les \mathbf{x}_i sont les valeurs et vecteurs propres généralisés, ici les quasiénergies ε_i et les composantes de Fourier des états de Floquet introduits ci-dessus (cf. (4.12)).

Afin d'obtenir des expressions explicites pour les éléments de matrice de \mathcal{H} , nous multiplions (4.9) par $2r$ et récrivons dans la forme matricielle donnée par (4.14)

$$\begin{aligned} 2r(\mathcal{H} - \varepsilon_i) | \psi_i^K \rangle &= \{rp^2 - 2 - 2(K\omega + \varepsilon_i)r \\ &\quad + 2rV(a^\dagger - a)\} | \psi_i^K \rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (4.19)$$

a^\dagger et a indiquant les couplages $\Delta K = +1$ et $\Delta K = -1$.

Les équations (4.19) mélangent *tous* les états hydrogénoïdes à L_z fixé. Un moyen très efficace de générer les couplages entre les différents états est l'utilisation du groupe dynamique $SO(2, 2)$ de l'atome d'hydrogène. L'idée de base est fondée sur l'équivalence de l'atome d'hydrogène de moment cinétique $L_z = m$ avec un système de deux oscillateurs harmoniques bidimensionnels, ayant chacun la même valeur de L_z . Cette équivalence peut être établie à partir d'une représentation de l'équation de Schrödinger (4.5) (avec $F = 0$ dans (4.4)) en coordonnées semiparaboliques μ, ν [66] (cf. (3.6) dans le cas de l'atome unidimensionnel):

$$\begin{cases} \mu = \sqrt{r+z}, \\ \nu = \sqrt{r-z}, \end{cases} \quad (4.20)$$

et permet de profiter des propriétés algébriques des générateurs du groupe dynamique $SO(2, 1)$ d'un oscillateur harmonique à deux dimensions [66]. Le groupe $SO(2, 2)$ étant isomorphe au produit direct $SO_S(2, 1) \otimes SO_T(2, 1)$, où S et T distinguent les deux oscillateurs harmoniques selon μ et ν , les générateurs de $SO(2, 2)$ sont donnés par l'ensemble des générateurs $S_1^{(\alpha)}, S_2^{(\alpha)}, S_3^{(\alpha)}$ de $SO_S(2, 1)$ et $T_1^{(\alpha)}, T_2^{(\alpha)}, T_3^{(\alpha)}$ de $SO_T(2, 1)$.

Grâce à la forme explicite [66] des combinaisons linéaires $T_i^{(\alpha)} \pm S_i^{(\alpha)}$

$$\begin{cases} T_1^{(\alpha)} + S_1^{(\alpha)} = \frac{r}{2\alpha} - \frac{\alpha r p^2}{2}, \\ T_2^{(\alpha)} + S_2^{(\alpha)} = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + i, \\ T_3^{(\alpha)} + S_3^{(\alpha)} = \frac{r}{2\alpha} + \frac{\alpha r p^2}{2}, \\ T_1^{(\alpha)} - S_1^{(\alpha)} = -\alpha \left[\frac{1}{2} z p^2 - p_z (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) \right] - \frac{z}{2\alpha}, \\ T_2^{(\alpha)} - S_2^{(\alpha)} = r p_z, \\ T_3^{(\alpha)} - S_3^{(\alpha)} = \alpha \left[\frac{1}{2} z p^2 - p_z (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) \right] - \frac{z}{2\alpha}. \end{cases} \quad (4.21)$$

on peut exprimer les différents termes apparaissant du côté droit de (4.19) comme combinaisons linéaires de $T_i^{(\alpha)}$ et $S_i^{(\alpha)}$. On obtient pour la partie opérateur de

(4.19):

$$\begin{aligned}
2r(\mathcal{H} - \varepsilon_i) = & \quad (4.22) \\
& \frac{1}{\alpha}(S_3^{(\alpha)} + T_3^{(\alpha)} - S_1^{(\alpha)} - T_1^{(\alpha)}) - 2 \\
& - 2\alpha(K\omega + \varepsilon_i)(S_3^{(\alpha)} + T_3^{(\alpha)} + S_1^{(\alpha)} + T_1^{(\alpha)}) \\
& - \frac{F}{i\omega}(a^\dagger - a)(T_2^{(\alpha)} - S_2^{(\alpha)}).
\end{aligned}$$

Ainsi (4.18) prend la forme explicite

$$(\mathcal{A} - \varepsilon_i \mathcal{B}) | \psi_i^K \rangle = 0, \quad (4.23)$$

avec

$$\begin{aligned}
\mathcal{A} = 2r\mathcal{H} = & \quad (4.24) \\
& \frac{1}{\alpha}(S_3^{(\alpha)} + T_3^{(\alpha)} - S_1^{(\alpha)} - T_1^{(\alpha)}) - 2 \\
& - 2\alpha K\omega(S_3^{(\alpha)} + T_3^{(\alpha)} + S_1^{(\alpha)} + T_1^{(\alpha)}) \\
& - \frac{F}{i\omega}(a^\dagger - a)(T_2^{(\alpha)} - S_2^{(\alpha)})
\end{aligned}$$

et

$$\mathcal{B} = 2r = 2\alpha(S_3^{(\alpha)} + T_3^{(\alpha)} + S_1^{(\alpha)} + T_1^{(\alpha)}). \quad (4.25)$$

Comme les éléments de matrice des générateurs $S_i^{(\alpha)}$ et $T_i^{(\alpha)}$ dans la base Sturmienne (4.17) sont connus [66], on aboutit aux expressions suivantes pour les éléments de matrice de \mathcal{A} et \mathcal{B} . Nous utiliserons la notation $| n \ell K \rangle^{(\alpha)}$ pour désigner une fonction Sturmienne $S_{n\ell m}^{(\alpha)}$ définie par (4.17), et “habillée” par K photons de micro-onde (i. e. $| n \ell K \rangle^{(\alpha)} = S_{n\ell m}^{(\alpha)} \otimes | K \rangle$). On a pour \mathcal{A} :

$$\begin{aligned}
2r\mathcal{H} | n \ell K \rangle^{(\alpha)} = & \quad (4.26) \\
& \left[\left(\frac{1}{\alpha} - 2\alpha K\omega \right) n - 2 \right] | n \ell K \rangle^{(\alpha)} \\
& - \left(\frac{1}{2\alpha} + \alpha K\omega \right) [(n + \ell + 1)(n - \ell)]^{1/2} | n + 1 \ell K \rangle^{(\alpha)} \\
& - \left(\frac{1}{2\alpha} + \alpha K\omega \right) [(n + \ell)(n - \ell - 1)]^{1/2} | n - 1 \ell K \rangle^{(\alpha)} \\
& - \frac{F}{2\omega} [(n + \ell + 2)(n + \ell + 1)]^{1/2} C_m^{\ell+1} | n + 1 \ell + 1 K + 1 \rangle^{(\alpha)} \\
& + \frac{F}{2\omega} [(n + \ell + 2)(n + \ell + 1)]^{1/2} C_m^{\ell+1} | n + 1 \ell + 1 K - 1 \rangle^{(\alpha)} \\
& - \frac{F}{2\omega} [(n - \ell)(n - \ell + 1)]^{1/2} C_m^\ell | n + 1 \ell - 1 K + 1 \rangle^{(\alpha)} \\
& + \frac{F}{2\omega} [(n - \ell)(n - \ell + 1)]^{1/2} C_m^\ell | n + 1 \ell - 1 K - 1 \rangle^{(\alpha)} \\
& + \frac{F}{2\omega} [(n - \ell - 1)(n - \ell - 2)]^{1/2} C_m^{\ell+1} | n - 1 \ell + 1 K + 1 \rangle^{(\alpha)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{F}{2\omega} [(n - \ell - 1)(n - \ell - 2)]^{1/2} C_m^{\ell+1} |n - 1 \ell + 1 K - 1 \rangle^{(\alpha)} \\
& + \frac{F}{2\omega} [(n + \ell)(n + \ell - 1)]^{1/2} C_m^\ell |n - 1 \ell - 1 K + 1 \rangle^{(\alpha)} \\
& - \frac{F}{2\omega} [(n + \ell)(n + \ell - 1)]^{1/2} C_m^\ell |n - 1 \ell - 1 K - 1 \rangle^{(\alpha)},
\end{aligned}$$

avec

$$C_m^\ell = \sqrt{\frac{\ell^2 - m^2}{4\ell^2 - 1}}. \quad (4.27)$$

L'expression pour \mathcal{B} s'écrit:

$$\begin{aligned}
2r |n \ell K \rangle^{(\alpha)} = & \quad (4.28) \\
& 2\alpha n |n \ell K \rangle^{(\alpha)} \\
& + \alpha [(n + \ell + 1)(n - \ell)]^{1/2} |n + 1 \ell K \rangle^{(\alpha)} \\
& + \alpha [(n + \ell)(n - \ell - 1)]^{1/2} |n - 1 \ell K \rangle^{(\alpha)}.
\end{aligned}$$

Nous fournissons enfin les expressions des fonctions Sturmiennees ainsi que des éléments de matrice de l'opérateur \mathcal{H} dans un modèle unidimensionnel de l'atome d'hydrogène, tel qu'il a déjà été partiellement présenté dans le chapitre 3. Notons d'ailleurs que la dimensionalité de l'Hamiltonien considéré ne rentre explicitement dans le formalisme théorique que par la représentation des degrés de liberté *internes* du problème. Ni le formalisme de Floquet traité dans le paragraphe précédent, ni la dilatation complexe que nous allons exposer ci-après ne s'y réfèrent.

En dimension 1, le Hamiltonien s'écrit, d'après (3.3), avec (3.11) et après l'omission du terme quadratique en F :

$$H_{1D} = \frac{p_z^2}{2} - \frac{F p_z \sin \omega t}{\omega} - \frac{1}{|z|}. \quad (4.29)$$

La base Sturmienne pour le potentiel Coulombien unidimensionnel dépend du nombre quantique $n \geq 1$ et du paramètre d'échelle α (Il s'agit du même paramètre d'échelle que dans le cas 3D et qu'au chapitre 3.3, (3.20)). Elle est donnée par [33]:

$$S_n^\alpha(z) = \frac{1}{\sqrt{n}} \left(\frac{2z}{\alpha}\right) e^{-z/\alpha} L_{n-1}^{(1)}\left(\frac{2z}{\alpha}\right). \quad (4.30)$$

Les éléments de matrice associés s'obtiennent à partir des générateurs $S_1^{(\alpha)}$, $S_2^{(\alpha)}$, $S_3^{(\alpha)}$ que nous avons déjà rencontrés pendant notre analyse du modèle classique (chapitre 3.3) et ci-dessus, comme éléments de la base du groupe $SO(2, 2)$ (Rappelons que l'utilisation des opérateurs $S_i^{(\alpha)}$, générateurs du groupe dynamique $SO(2, 1)$, permet une comparaison simple avec les quantités classiques correspondantes; cf. eqs. (3.25) et (3.26)). En fait, l'opérateur \mathcal{H}_{1D} "unidimensionnel"

(défini par la première égalité en (4.8)) se déduit de l'expression 3D de l'eq. (4.24) en ne retenant que les termes en $S_i^{(\alpha)}$, et de même pour l'opérateur $2z$. Par conséquent, on obtient pour la matrice \mathcal{A} (Eq. (4.23)) et donc pour $2r\mathcal{H}_{1D}$ dans la base Sturmienne unidimensionnelle (4.30) :

$$\begin{aligned}
2z\mathcal{H}_{1D} |n K \rangle^{(\alpha)} = & \quad (4.31) \\
& \left[\left(\frac{1}{\alpha} - 2\alpha K\omega \right) n - 2 \right] |n K \rangle^{(\alpha)} \\
& - \left(\frac{1}{2\alpha} + \alpha K\omega \right) [n(n+1)]^{1/2} |n+1 K \rangle^{(\alpha)} \\
& - \left(\frac{1}{2\alpha} + \alpha K\omega \right) [n(n-1)]^{1/2} |n-1 K \rangle^{(\alpha)} \\
& - \frac{F}{2\omega} [n(n+1)]^{1/2} |n+1 K+1 \rangle^{(\alpha)} \\
& + \frac{F}{2\omega} [n(n+1)]^{1/2} |n+1 K-1 \rangle^{(\alpha)} \\
& + \frac{F}{2\omega} [n(n-1)]^{1/2} |n-1 K+1 \rangle^{(\alpha)} \\
& - \frac{F}{2\omega} [n(n-1)]^{1/2} |n-1 K-1 \rangle^{(\alpha)},
\end{aligned}$$

et pour la matrice \mathcal{B} , à savoir l'opérateur $2z$:

$$\begin{aligned}
2z |n K \rangle^{(\alpha)} = & \quad (4.32) \\
& 2\alpha n |n K \rangle^{(\alpha)} \\
& + \alpha [n(n+1)]^{1/2} |n+1 K \rangle^{(\alpha)} \\
& + \alpha [n(n-1)]^{1/2} |n-1 K \rangle^{(\alpha)}.
\end{aligned}$$

4.2.2 Les bases paraboliques et “lambda”

Jusqu'ici nous avons travaillé avec une base Sturmienne sphérique (4.17) paramétrisée par le nombre quantique principal n (≥ 1), le moment cinétique ℓ (≥ 0) et sa projection m sur l'axe de quantification. Cela veut dire que nous avons choisi la représentation habituelle des degrés de liberté atomiques, dans laquelle les opérateurs L^2 et L_z sont diagonaux, ainsi que le Hamiltonien de l'atome non-perturbé, H_0 .

Tandis que $L_z = m = \text{const.}$ est imposé par la symétrie de notre problème (et définit le spectre des générateurs $T_i^{(\alpha)}$, $S_i^{(\alpha)}$ [66]), le choix de n et de ℓ était arbitraire. D'autres choix de base sont possibles. Nous en présentons ci-dessous quelques-unes : on verra au chapitre 6 que, suivant les cas, une base ou l'autre décrit de manière plus satisfaisante la dynamique quantique de notre système.

Les nombres quantiques n et ℓ sont en effet les valeurs propres de certains polynômes des générateurs $T_i^{(\alpha)}$, $S_i^{(\alpha)}$ tels qu'ils sont explicités en (4.21). On a

plus précisément [66]:

$$\left\{ \begin{array}{l} (T_3^{(\alpha)} + S_3^{(\alpha)}) | n \ell m \rangle^{(\alpha)} = n | n \ell m \rangle^{(\alpha)}, \\ L^2 | n \ell m \rangle^{(\alpha)} = \\ \ell(\ell + 1) | n \ell m \rangle^{(\alpha)} = \\ [(T_3^{(\alpha)} + S_3^{(\alpha)})^2 - (T_1^{(\alpha)} + S_1^{(\alpha)})^2 - (T_2^{(\alpha)} + S_2^{(\alpha)})^2] | n \ell m \rangle^{(\alpha)}. \end{array} \right. \quad (4.33)$$

La première équation en (4.33) est une conséquence de l'équivalence de H_0 et $T_3^{(\alpha)} + S_3^{(\alpha)}$, et les signes négatifs au milieu de la deuxième équation s'expliquent par la métrique $(- - +)$ du groupe $SO(2, 1)$ [66].

Il est maintenant possible de choisir une autre représentation, c'est-à-dire un autre ensemble complet d'observables qui s'expriment de manière différente par les $T_i^{(\alpha)}$, $S_i^{(\alpha)}$.

Un choix bien connu sont les **états paraboliques** $| n_1 n_2 m \rangle^{(\alpha)}$ ($n_1, n_2 \geq 0$), états propres de $T_3^{(\alpha)} + S_3^{(\alpha)}$ et de $T_3^{(\alpha)} - S_3^{(\alpha)}$. A part L_z ils diagonalisent H_0 (ou $T_3^{(\alpha)} + S_3^{(\alpha)}$, cf. ci-dessus) et $T_3^{(\alpha)} - S_3^{(\alpha)}$, qui coïncide avec la projection R_z du vecteur de Runge-Lenz \mathbf{R}

$$\mathbf{R} = \frac{1}{\sqrt{-2H_0}} \left(\frac{1}{2} (\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) - \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \quad (4.34)$$

sur l'axe de quantification. On obtient [66]:

$$\left\{ \begin{array}{l} (T_3^{(\alpha)} + S_3^{(\alpha)}) | n_1 n_2 m \rangle^{(\alpha)} = (n_1 + n_2 + |m| + 1) | n_1 n_2 m \rangle^{(\alpha)}, \\ (T_3^{(\alpha)} - S_3^{(\alpha)}) | n_1 n_2 m \rangle^{(\alpha)} = (n_2 - n_1) | n_1 n_2 m \rangle^{(\alpha)}, \end{array} \right. \quad (4.35)$$

dont la comparaison de la première équation avec la première égalité en (4.33) fournit

$$\left\{ \begin{array}{l} n_1 + n_2 + |m| + 1 = n, \\ 0 \leq n_1, n_2 \leq n - |m| - 1. \end{array} \right. \quad (4.36)$$

Nous comprendrons dans la suite par **état parabolique extrémal** un état $| n_1 n_2 m \rangle^{(\alpha)}$ avec $n_2 - n_1 = \pm(n - |m| - 1)$, c'est-à-dire un état où $|R_z|$ est maximal. Nous ne considérerons en fait que le cas $m = 0$.

Les états $| n_1 = 0 n_2 = n - 1 m = 0 \rangle^{(\alpha)}$ et $| n_1 = n - 1 n_2 = 0 m = 0 \rangle^{(\alpha)}$ sont des états confinés le long de l'axe \hat{z} et des objets quasi-unidimensionnels orientés le long de l'axe de polarisation de la micro-onde. La figure 4.2 en montre l'exemple de $| n_1 = 22 n_2 = 0 m = 0 \rangle$. les états paraboliques sont des "états quasi-unidimensionnels" et les meilleurs candidats pour une dynamique quasi-unidimensionnelle de l'atome tridimensionnel [27, 33] (cf. 1 et 6.2.4).

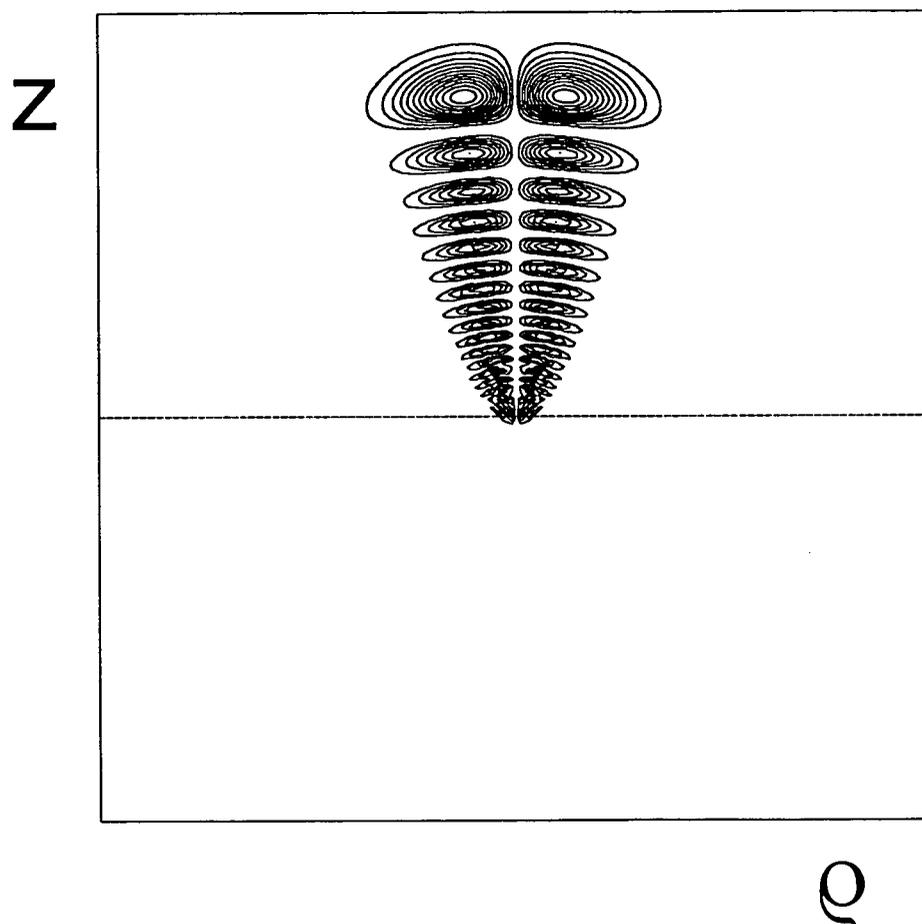


FIG. 4.2 - Contours d'équiprobabilité de présence pour l'électron d'un état parabolique extrême $|n_1 = 22 \ n_2 = 0 \ m = 0 \rangle$ en coordonnées cylindriques z, ρ . $z, \rho = \pm 1200$ a.u..

Notons finalement que la parité n'est pas déterminée pour les états $|n_1 n_2 m \rangle^{(\alpha)}$. La transformation de parité correspond à échanger n_1 et n_2 , ce qui *inverse* R_z et ainsi *l'orientation* de la densité électronique par rapport au champ extérieur.

Une troisième représentation possible de l'atome d'hydrogène est donnée par la diagonalisation de L_z , de H_0 et de l'opérateur

$$(T_3^{(\alpha)} + S_3^{(\alpha)})^2 - (T_1^{(\alpha)} - S_1^{(\alpha)})^2 - (T_2^{(\alpha)} - S_2^{(\alpha)})^2.$$

Ce dernier coïncide pour $\alpha = n$ avec le carré $\vec{\lambda}^2$ d'un opérateur

$$\vec{\lambda} = (R_x, R_y, L_z) \quad (4.37)$$

dont les composantes obéissent aux règles de commutation d'un moment cinétique en trois dimensions

$$[\lambda_i, \lambda_j] = i\epsilon_{ijk}\lambda_k, \quad (4.38)$$

avec ϵ_{ijk} le tenseur antisymétrique. Ceci implique

$$\begin{cases} (T_3^{(\alpha)} + S_3^{(\alpha)})^2 - (T_1^{(\alpha)} - S_1^{(\alpha)})^2 - (T_2^{(\alpha)} - S_2^{(\alpha)})^2 = \\ R_x^2 + R_y^2 + L_z^2 = \vec{\lambda}^2. \end{cases} \quad (4.39)$$

Nous définissons les états "lambda" $|n \lambda m \rangle^{(\alpha)}$ par

$$\begin{cases} [(T_3^{(\alpha)} + S_3^{(\alpha)})^2 - (T_1^{(\alpha)} - S_1^{(\alpha)})^2 - (T_2^{(\alpha)} - S_2^{(\alpha)})^2] |n \lambda m \rangle^{(\alpha)} = \\ \lambda(\lambda + 1) |n \lambda m \rangle^{(\alpha)}, \\ (T_3^{(\alpha)} + S_3^{(\alpha)}) |n \lambda m \rangle^{(\alpha)} = n |n \lambda m \rangle^{(\alpha)}, \\ 0 \leq \lambda \leq n - 1 \text{ entier}, \quad -\lambda \leq m \leq \lambda \text{ entier.} \end{cases} \quad (4.40)$$

Nous comprendrons par état "lambda" extrémal un état $|n \lambda = n - 1 \ m \rangle^{(\alpha)}$. Nous allons nous restreindre en fait au cas $L_z = m = 0$, qui correspond (avec $\alpha = n$) à une densité électronique qui est entièrement confinée dans le plan perpendiculaire à l'axe \hat{z} . Comme de tels états ont l'allure d'un disque, on les appelle aussi "atomes plats" [66]. La figure 4.3 montre l'état $|n = 23 \ \lambda = 22 \ m = 0 \rangle$.

Ayant défini les états extrémaux des bases paraboliques et "lambda", faisons le aussi pour notre base de départ, la base sphérique des états $|n \ell m \rangle^{(\alpha)}$. En analogie avec les états "lambda" nous désignerons par état sphérique extrémal l'état $|n \ell = n - 1 \ m \rangle^{(\alpha)}$, à une valeur de m donnée.

Pour $m = 0, \ell = n - 1$ implique $\mathbf{L} = (L_x, L_y, 0)$ (cf. (4.33)), avec $\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2$ maximal, ce qui correspond à une densité électronique isotrope et d'excitation angulaire maximale. Cela correspond à une localisation sur un cercle dans le plan (ρ, z) . Par conséquent, nous appellerons cet état aussi l'état circulaire incliné,

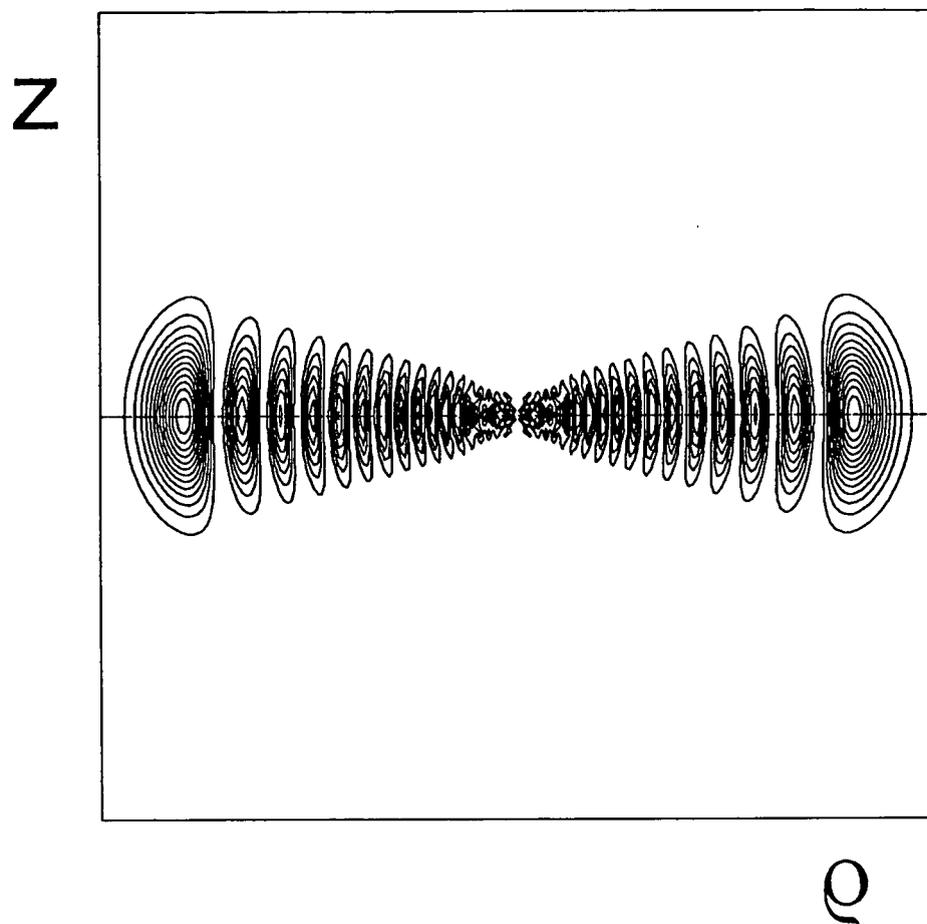


FIG. 4.3 - Contours d'équiprobabilité de présence pour l'électron d'un état "lambda" extrémal $|n = 23 \lambda = 22 m = 0\rangle$ en coordonnées cylindriques z, ρ . $z, \rho = \pm 1200$ a.u..

en opposition avec l'état circulaire $|n \ell = n - 1 m = n - 1 \rangle^{(\alpha)}$, dont la densité électronique est concentrée sur un cercle dans le plan (x, y) . Cela est un autre état extrémal de la base sphérique $|n \ell m \rangle^{(\alpha)}$ qui appartient à une autre valeur de m que les atomes quasi-unidimensionnels ou les atomes plats. Les figures 4.4 et 4.5 montrent, respectivement, les états $|n = 23 \ell = 22 m = 0 \rangle$ et $|n = 23 \ell = 22 m = 22 \rangle$.

L'état circulaire $|n \ell = n - 1 m = n - 1 \rangle^{(\alpha)}$ coïncide d'ailleurs avec l'état extrémal $|n \lambda = n - 1 m = n - 1 \rangle^{(\alpha)}$ de la base "lambda" et avec l'état parabolique $|n_1 = 0 n_2 = 0 m = n - 1 \rangle^{(\alpha)}$ et est dans ce sens un état extrémal commun aux trois représentations que nous venons d'introduire.

Les différentes bases que nous avons décrites diagonalisent toutes les trois les opérateurs L_z et H_0 et ne diffèrent donc que par le choix du troisième opérateur à diagonaliser simultanément.

Nous avons introduit les états extrémaux des trois différentes bases $|n \ell m \rangle^{(\alpha)}$, $|n \lambda m \rangle^{(\alpha)}$, $|n_1 n_2 m \rangle^{(\alpha)}$ car nous trouverons (cf. 6.2.2) qu'ils peuvent servir comme "ossature" du processus d'excitation d'un atome d'hydrogène tridimensionnel par une micro-onde.

Pour compléter notre description "exacte" de l'interaction entre un atome et un champ électromagnétique, il ne nous reste que le traitement du couplage au continuum, ce qui est le sujet du paragraphe suivant.

4.3 Le couplage au continuum et la dilatation complexe

Après avoir formulé notre problème physique sous la forme d'une équation aux valeurs propres généralisée engendrée par deux matrices hermitiennes, Eqs. (4.18) et (4.22), nous allons maintenant considérer le couplage des états atomiques liés aux états du continuum induit par la perturbation externe.

En présence d'un tel champ oscillant, toutes les valeurs propres discrètes du spectre atomique sont couplées au continuum et prennent une largeur Γ finie [114, 115]. Le spectre est donc *entièrement continu*, il n'y a plus de valeurs propres discrètes isolées du continuum atomique, mais plutôt des valeurs propres de résonances plongées dans un continuum qui recouvre tout l'axe réel des énergies.

Comme toute simulation numérique doit se contenter d'une base tronquée de l'espace de Hilbert, une densité d'états correspondant à celle d'un continuum ne peut pas être réalisée. Par conséquent, il serait très difficile d'obtenir une approximation fiable au spectre de notre système à partir d'une solution numérique de (4.18) dans la forme (4.26), (4.28). Afin de résoudre ce problème spectral sans approximation, nous employons la technique de "dilatation complexe" de l'Hamiltonien [114, 115, 116, 117, 118, 119, 120, 121, 122]. Elle nous permettra l'accès *direct* aux positions et largeurs des résonances (et aux vecteurs propres associés) et ainsi l'identification individuelle des états de Floquet qui génèrent la

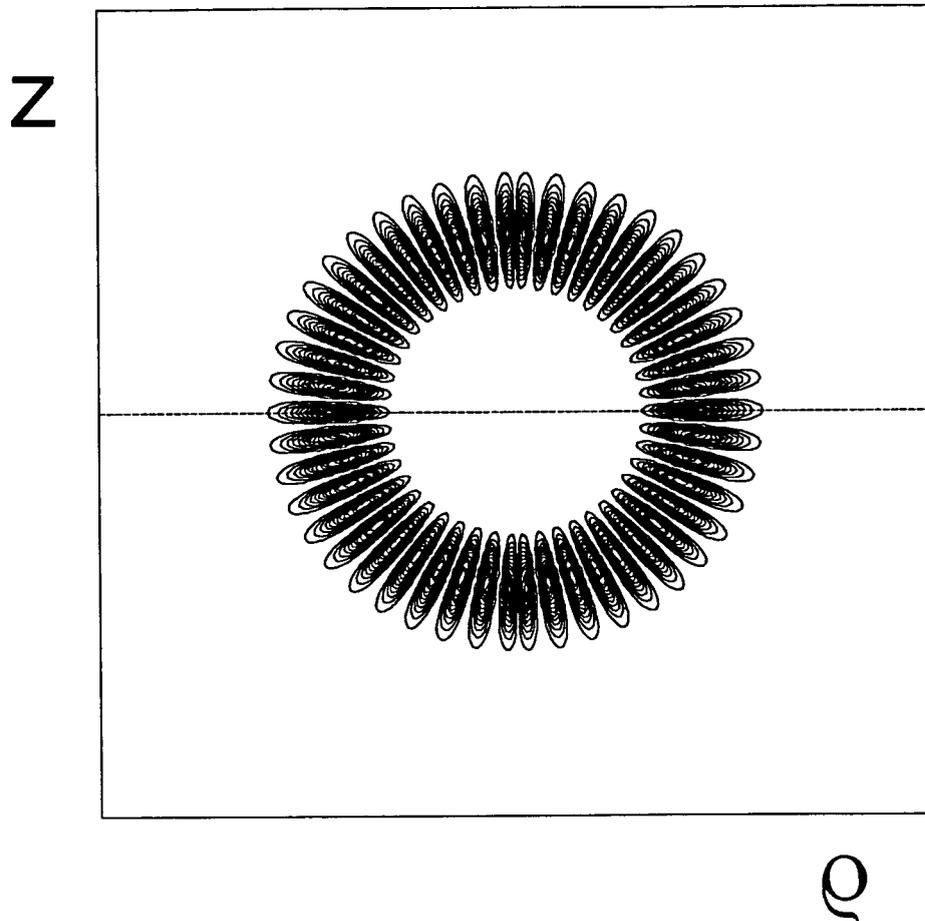


FIG. 4.4 - Contours d'équiprobabilité de présence pour l'électron d'un état sphérique extrémal (circulaire incliné), $m = 0$, $|n = 23 \ell = 22 m = 0\rangle$ en coordonnées cylindriques z, ρ . $z, \rho = \pm 1200$ a.u..

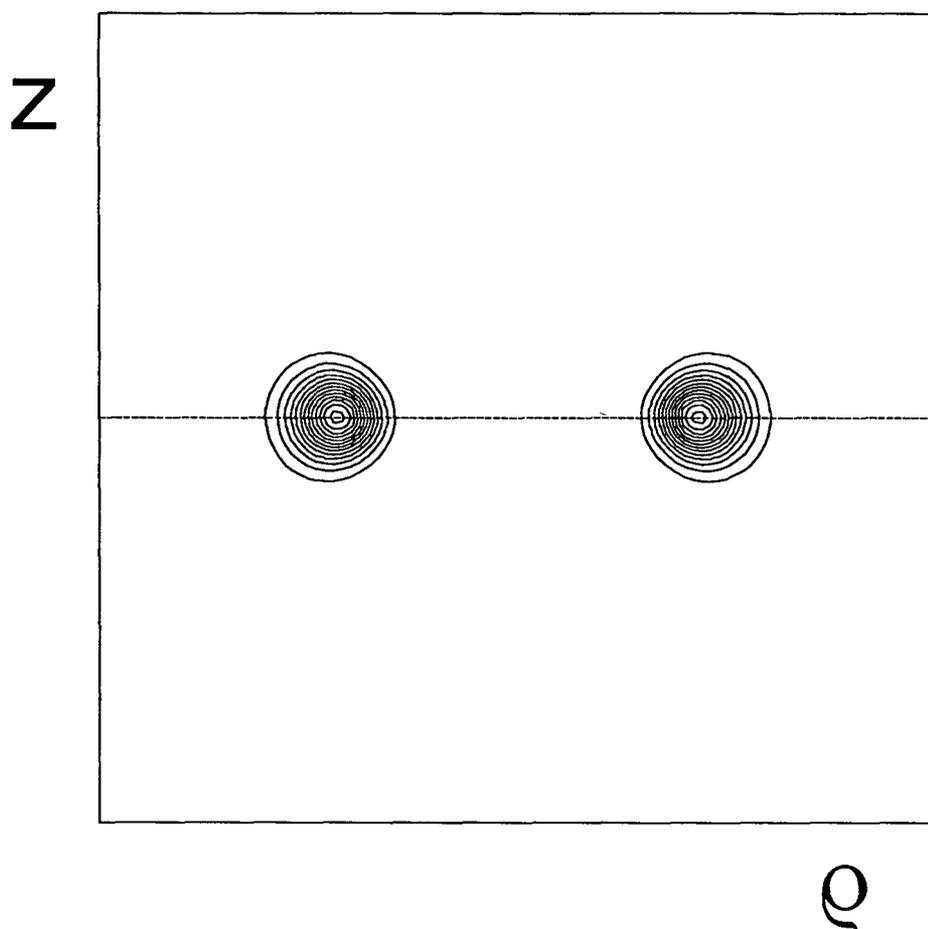


FIG. 4.5 - Contours d'équiprobabilité de présence pour l'électron d'un état circulaire $|n = 23 \ell = 22 m = 22 \rangle$ en coordonnées cylindriques z, ρ . $z, \rho = \pm 1200$ a.u..

dynamique quantique du processus d'excitation et d'ionisation auquel nous nous intéressons.

La dilatation complexe nous servira en tant qu'outil mathématique dont nous ne décrivons pas les fondements (tout-à-fait non-triviaux) ici. Pour tout détails par exemple à l'égard de la classe de potentiels pour lesquels la méthode est applicable (dont le nôtre), voir les références [114, 115, 121, 122].

L'idée générale de la méthode consiste à étudier la fonction de Green du système, qui possède un pôle à chaque position d'une valeur propre dans le plan complexe [122]. Pour un système avec un spectre continu, la fonction de Green a une coupure le long de l'axe réel et les résonances correspondent aux pôles de son prolongement analytique dans le plan complexe. En utilisant certaines propriétés d'analyticité, on peut obtenir son comportement sur l'axe réel (étant la partie importante pour le calcul de toute propriété physique) à partir des positions et des résidus de ses pôles complexes. La dilatation complexe permet de calculer directement ces pôles en tant que valeurs propres d'un opérateur *non-hermitien*, ce dernier étant défini par une "complexification" ("dilatation complexe, complex dilation", "rotation complexe, complex rotation", "complex scaling") des opérateurs position et impulsion [122]:

$$\begin{cases} \mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}e^{i\theta}, \\ \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}e^{-i\theta}, \end{cases} \quad (4.41)$$

où θ est un paramètre réel ($0 < \theta \leq \pi/4$) appelé **angle de rotation**. La substitution de (4.41) dans (4.8) fournit l'**Hamiltonien tourné** pour l'interaction avec un champ oscillant:

$$\mathcal{H}_\theta = \frac{\mathbf{p}^2 e^{-2i\theta}}{2} - \frac{F p_z e^{-i\theta} \sin \omega t}{\omega} - \frac{e^{-i\theta}}{r} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (4.42)$$

Si l'on appliquait une dilatation réelle, c'est-à-dire si l'on utilisait une transformation $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}e^\theta$, $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}e^{-\theta}$, le spectre de l'Hamiltonien tourné serait identique à celui de l'Hamiltonien non-tourné, à cause du caractère unitaire d'une dilatation réelle. Pour une dilatation complexe, la situation est complètement différente, \mathcal{H}_θ n'est plus un opérateur hermitien. Son spectre est complexe et la relation de celui-ci au spectre de \mathcal{H} est loin d'être triviale.

Avec l'opérateur de dilatation complexe

$$R(\theta) = \exp\left(-\theta \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{2}\right), \quad (4.43)$$

on peut écrire formellement l'Hamiltonien tourné comme

$$\mathcal{H}_\theta = R(\theta)\mathcal{H}R(-\theta). \quad (4.44)$$

dont le spectre est caractérisé par les propriétés suivantes [114]:

- Le spectre *complexe* est périodique avec la période ω , comme celui de l'Hamiltonien non tourné.

- Il n’y a pas de valeurs propres réelles, c’est-à-dire pas d’états discrets (sauf pour, éventuellement, des valeurs très exceptionnelles de F et de ω).
- Il y a un spectre continu le long de demi-droites commençant aux énergies réelles $K\omega$, K entier, tourné d’un angle -2θ par rapport à l’axe réel.
- En plus, et très essentiellement, il y a des valeurs propres isolées complexes situées dans le demi-plan inférieur (parties imaginaires négatives) qui correspondent aux résonances de \mathcal{H} . Une fois que θ a été choisi suffisamment grand pour “découvrir” les résonances, la position complexe de chacune de celles-ci est indépendante de θ . La partie réelle de la valeur propre est la position, (-2) fois sa partie imaginaire la largeur de la résonance.
- Les vecteurs propres associés à ces valeurs propres complexes sont des fonctions d’onde de carré sommable. Ils contiennent toute l’information sur le processus physique auquel nous nous intéressons : la partie “interne” (c’est-à-dire la population des états liés de l’hydrogène) de la résonance, ainsi que le couplage avec le continuum, et toute l’information de phase pour prendre en compte les effets d’interférence.

Ces caractéristiques sont visualisées à la figure 4.6.

Les éléments de matrice de \mathcal{H}_θ peuvent être obtenus directement à partir de ceux de \mathcal{H} , par multiplication avec la puissance appropriée de $e^{i\theta}$ (voir les équations (4.8), (4.26),(4.28), (4.31),(4.42)). Les règles de sélection implicites dans (4.26),(4.28), (4.31) ne sont donc pas affectées par la transformation (4.44). Ceci est une conséquence du fait que $R(\theta)$ fait partie du groupe dynamique $SO(2,2)$ [66], et représente ainsi un avantage supplémentaire de la représentation de l’atome par une base Sturmienne (cf. paragraphe 4.2.1).

Si l’on emploie une base engendrée par des fonctions réelles (telles que les Sturmiennes définies aux Eqs. (4.17), (4.30), avec α réel), la recherche des valeurs et vecteurs propres de \mathcal{H}_θ se réduit alors à la solution d’un problème aux valeurs propres généralisé de type (4.18) défini par des matrices \mathcal{A} et \mathcal{B} complexes symétriques (*non pas* complexes hermitiennes).

Nous reprenons maintenant les notations introduites au paragraphe 4.1 pour dériver une expression explicite pour l’opérateur d’évolution temporelle, à calculer à partir des résultats d’une diagonalisation numérique de \mathcal{H}_θ . Cette expression sera d’abord obtenue dans une forme générale et indépendante de la base dans laquelle la diagonalisation est réalisée. Seulement à la fin de ce paragraphe, nous l’écrirons de manière adaptée à notre choix spécial d’une base Sturmienne (4.17).

Les vecteurs propres de \mathcal{H}_θ sont définis par (en analogie avec (4.9))

$$\mathcal{H}_\theta |\psi_{i\theta}\rangle = \varepsilon_{i\theta} |\psi_{i\theta}\rangle, \quad (4.45)$$

avec $\varepsilon_{i\theta}$ complexe, et leurs composantes de Fourier par (équation (4.12))

$$|\psi_{i\theta}(t)\rangle = \sum_K e^{-iK\omega t} |\psi_{i\theta}^K\rangle. \quad (4.46)$$

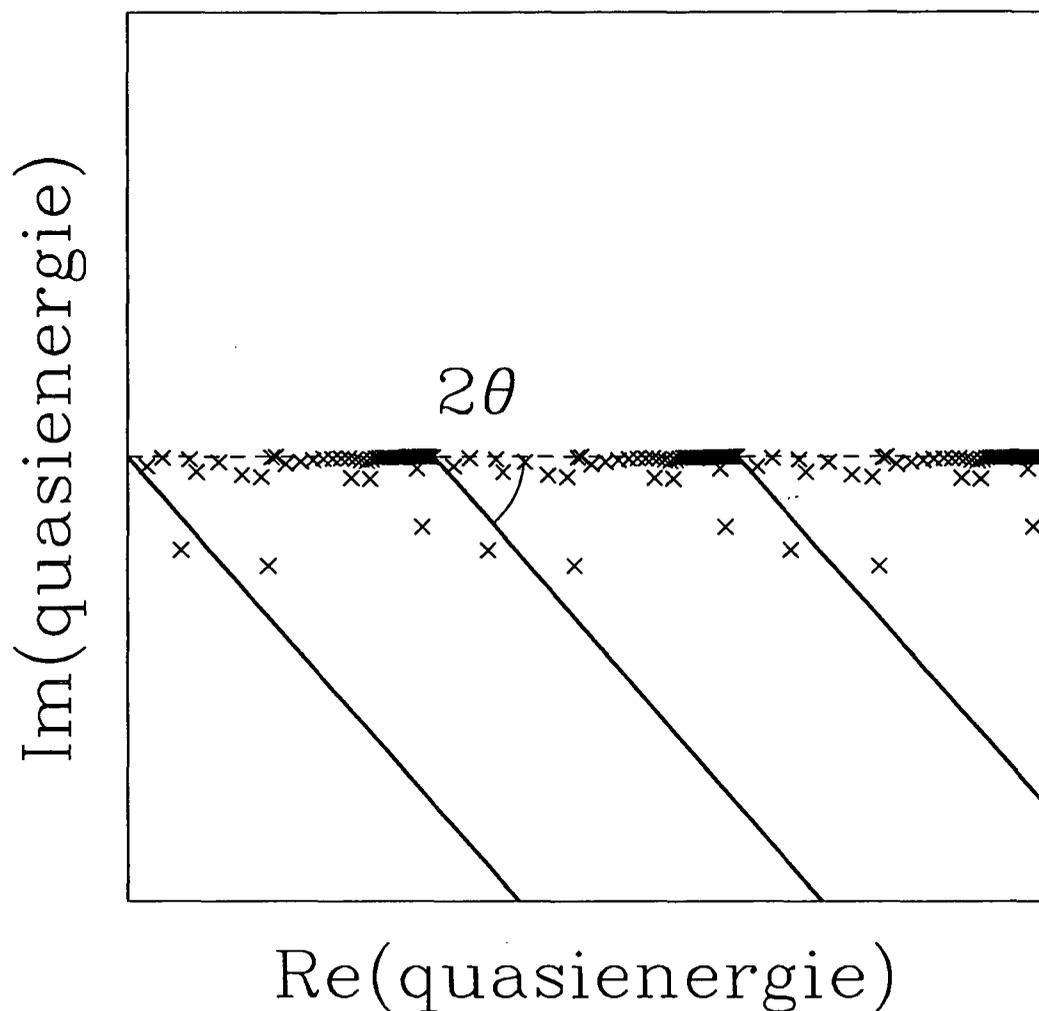


FIG. 4.6 - Représentation schématique d'un spectre de l'Hamiltonien tourné \mathcal{H}_θ (4.42) du problème micro-onde, dans le plan complexe. Le spectre est périodique avec la période ω , la pulsation du champ micro-onde. A cause de la dilatation complexe (4.41), les continua tournent d'un angle -2θ dans le demi-plan inférieur. Les résonances du spectre sont découvertes par cette transformation et apparaissent comme valeurs propres complexes isolées.

Pour une matrice complexe symétrique, les vecteurs propres de gauche sont les transposés et *non pas* les conjugués hermitiques des vecteurs propres de droite. Les $|\psi_{i\theta}^K\rangle$ forment ainsi une base orthonormée (voir équation (4.13)):

$$\sum_K \langle \overline{\psi_{j\theta}^{K+\Delta K}} | \psi_{i\theta}^K \rangle = \delta_{ij} \delta_{\Delta K, 0}, \quad (4.47)$$

où $\langle \overline{\psi} |$ désigne le complexe conjugué de $\langle \psi |$, c'est-à-dire le transposé de $|\psi\rangle$. Ils obéissent aussi à la relation de fermeture suivante:

$$\sum_{i, K_1, K_2} |\psi_{i\theta}^{K_2}\rangle \langle \overline{\psi_{i\theta}^{K_1}}| = 1, \quad (4.48)$$

où la somme sur i porte sur une zone de Floquet (cf. paragraphe 4.1).

Utilisant les vecteurs propres $|\psi_{i\theta}(t)\rangle$, il faut noter que la partie spatiale de la fonction d'onde ne doit être que transposée tandis qu'il faut bien prendre le complexe conjugué de la partie dépendant du temps $e^{-iK\omega t}$. Cela implique que des expressions simples comme (4.10) et (4.11) ne s'appliquent plus après une dilatation complexe, du fait que cette transformation n'affecte que les coordonnées spatiales et pas celle de temps.

Il est néanmoins possible de donner une expression explicite de l'opérateur d'évolution de l'Hamiltonien non-tourné, à partir des valeurs et vecteurs propres de \mathcal{H}_θ . Cela est une conséquence de la propriété de l'Hamiltonien tourné de représenter le prolongement analytique de la fonction de Green et, par extension, de l'opérateur d'évolution, au voisinage du noyau de l'atome [116, 122]. Avec l'équation (4.44) on obtient, en analogie avec (4.16):

$$U(t_1, t_2) = \sum_{i, K_1, K_2} e^{-i\varepsilon_i(t_2-t_1)} e^{iK_1\omega t_1} e^{-iK_2\omega t_2} R(-\theta) |\psi_{i\theta}^{K_2}\rangle \langle \overline{\psi_{i\theta}^{K_1}}| R(\theta). \quad (4.49)$$

Les valeurs propres ε_i (définies par (4.45)) dans cette équation sont complexes avec des parties imaginaires négatives. Par conséquent, les termes $e^{-i\varepsilon_i(t_2-t_1)}$ décroissent exponentiellement pour $t_2 > t_1$. Dans le cas $t_2 < t_1$ on doit utiliser une autre expression, en partant du prolongement analytique de la fonction de Green dans le demi-plan supérieur du plan complexe, et en employant les énergies complexes conjuguées ε_i^* .

Nous observons aussi que le caractère unitaire de l'opérateur d'évolution, quoiqu'il soit toujours garanti, n'apparaît pas explicitement dans (4.49), les ε_i ayant des valeurs complexes. Cela n'est pas très surprenant, car nous utilisons un prolongement analytique dans le plan complexe pour calculer ce qui se passe sur l'axe réel.

Une limitation de notre approche est l'applicabilité de (4.49) seulement pour le calcul d'éléments de matrice entre des fonctions de carré sommable, donc par exemple entre des états liés de l'atome d'hydrogène avec des fonctions radiales réelles (telles qu'elles coïncident avec leurs complexes conjuguées). Dans ces conditions on écrit:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_2 | U(t_1, t_2) | \Phi_1 \rangle = & \quad (4.50) \\ \sum_{i, K_1, K_2} e^{-i\varepsilon_i(t_2-t_1)} e^{iK_1\omega t_1} e^{-iK_2\omega t_2} & \langle \overline{\psi_{i\theta}^{K_2}} | R(\theta) | \Phi_2 \rangle \langle \overline{\psi_{i\theta}^{K_1}} | R(\theta) | \Phi_1 \rangle, \end{aligned}$$

où $|\Phi_{1,2}\rangle$ sont deux états liés. A l'aide de cette expression, nous pouvons décrire l'évolution d'un état lié initial quelconque ainsi que de sa distribution sur la base de l'atome d'hydrogène non-perturbé.

A ce point, nous avons complété l'arsenal d'outils techniques que nous utiliserons pour la simulation de l'interaction d'un atome avec un champ oscillant intense. Pourtant, l'équation (4.50) est une formulation générale de l'opérateur d'évolution qui ne contient pas encore explicitement la manière d'obtenir les vecteurs propres $|\psi_{i\theta}\rangle$.

Comme nous l'avons exposé au paragraphe précédent, nous allons effectuer la diagonalisation de \mathcal{H} dans une base Sturmienne (4.17), ce qui est équivalent à la solution du problème aux valeurs propres généralisé (4.23). En conséquence de cette représentation de \mathcal{H} par les générateurs du groupe dynamique $SO(2, 2)$, l'égalité (4.23) induit la définition des éléments de matrice de \mathcal{H} par rapport à un produit scalaire

$$\langle \cdot | 2r | \cdot \rangle,$$

ce qui s'est déjà manifesté dans les équations (4.26) et (4.31). Pour l'évaluation de (4.50) à partir des valeurs et vecteurs propres ε_i , $|\psi_{i\theta}^{K_j}\rangle$ représentés dans une base Sturmienne (4.17) (ou (4.30)) il faut donc substituer

$$R(\theta) \rightarrow R(\theta) \times 2r, \quad R(-\theta) \rightarrow 2r \times R(-\theta) \quad (4.51)$$

dans (4.49) et (4.50).

Pour des calculs quantitatifs, il reste à fournir la représentation de $R(\theta)$ dans la base Sturmienne (4.17). L'action de l'opérateur de dilatation sur un état $|\psi\rangle$ dans sa représentation spatiale est définie par [122]

$$R(\theta) |\psi(\mathbf{r})\rangle = e^{i\frac{3\theta}{2}} |\psi(\mathbf{r}e^{i\theta})\rangle, \quad (4.52)$$

où $R(\theta)$ est en fait une exponentielle de la somme $U_2^{(\alpha)} = S_2^{(\alpha)} + T_2^{(\alpha)}$ des générateurs du groupe $SO(2, 2)$:

$$R(\theta) = \exp(\theta U_2^{(\alpha)}), \quad \theta \in [0; 2\pi[, \quad (4.53)$$

et peut être généralisé à un objet permettant une dilatation "mixte", c'est-à-dire un produit d'une dilatation réelle par une dilatation imaginaire (donc une rotation complexe):

$$R(\gamma) = \exp(-i\gamma U_2^{(\alpha)}), \quad \gamma = \eta + i\theta, \quad \eta \in [0; \infty[, \quad \theta \in [0; 2\pi[. \quad (4.54)$$

L'opérateur $U_2^{(\alpha)}$ s'écrit, comme on peut le déduire déjà des équations (4.44) et (4.53), en fonction de la position et de l'impulsion

$$U_2^{(\alpha)} = -\frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{2} \quad (4.55)$$

et est en fait indépendant de α . La complexification des coordonnées conjuguées \mathbf{r} et \mathbf{p} (4.41) ramène donc de façon naturelle à la forme (4.53) d'une dilatation complexe.

Comme les éléments de matrice de $U_2^{(\alpha)}$ dans la base Sturmienne sont connus [66], on peut en déduire ceux de $R(\gamma)$. Ces derniers ne mélangent que le nombre quantique principal et laissent ℓ (et m , bien entendu) inchangé (suite à la symétrie sphérique d'une dilatation), dont on conclut que l'action de $R(\gamma)$ sur la base Sturmienne unidimensionnelle (4.30) s'obtient à partir des éléments de matrice dans la base tridimensionnelle en prenant simplement $\ell = 0$. Dans ce qui a été dit ci-dessus, cela revient à remplacer $U_2^{(\alpha)}$ par $S_2^{(\alpha)}$, de la même façon qu'on avait obtenu \mathcal{H}_{1D} à partir de \mathcal{H}_{3D} . On a donc finalement

$$\begin{aligned} {}^{(\alpha)} \langle n \ell | R(\gamma) | n' \ell \rangle^{(\alpha)} &= {}^{(\alpha)} \langle n \ell | \exp(-i\gamma U_2^{(\alpha)}) | n' \ell \rangle^{(\alpha)} = \quad (4.56) \\ &= \frac{(-1)^{n-\ell-1}}{(2\ell+1)!} \frac{1}{(\cosh \frac{\gamma}{2})^{2\ell+1}} (\tanh \frac{\gamma}{2})^{n+n'} \left[\frac{(n+\ell)!(n'+\ell)!}{(n-\ell-1)!(n'-\ell-1)!} \right]^{1/2} \\ &\times F \left[-n+\ell+1, -n'+\ell+1, 2\ell+2; -\frac{1}{\sinh^2 \frac{\gamma}{2}} \right], \end{aligned}$$

avec $F[a, b, c; d]$ la fonction hypergéométrique.

4.4 Quelques quantités physiques

Dans les trois premiers paragraphes de cette section, nous avons développé l'appareil technique dont nous aurons besoin pour une simulation aussi réaliste que possible de l'interaction entre atome et champ. Dans ce dernier paragraphe nous allons maintenant montrer comment extraire toute l'information sur notre système physique des résultats d'une diagonalisation numérique de l'Hamiltonien tourné \mathcal{H}_θ .

Avec l'expression (4.50) pour les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution et la représentation (4.56) de l'opérateur de dilatation dans la base Sturmienne (4.17), nous sommes capables de suivre l'évolution temporelle d'une grande variété de quantités physiques importantes pour la compréhension du processus d'excitation et d'ionisation d'un atome par un champ oscillant intense.

Nous allons en particulier dériver des expressions explicites pour la dépendance temporelle de la probabilité d'ionisation et pour la dynamique temporelle de la densité de probabilité de l'électron atomique sous l'influence de la perturbation, représentée dans l'espace de configuration et - pour le modèle unidimensionnel - projetée sur l'espace des phases classique.

A cause de son importance immédiate pour la comparaison aux expériences réelles, nous débutons avec la probabilité d'ionisation.

4.4.1 La probabilité d'ionisation

La probabilité de retrouver un atome ayant été préparé dans un état initial lié $|\Phi_0\rangle$ à l'instant t_1 toujours dans un état lié quelconque à l'instant t_2 s'obtient

à partir de la projection de $|\Phi_0\rangle$ propagée par $U(t_1, t_2)$ sur l'espace des états liés, donc par la somme

$$P_{\text{lié}} = \sum_{\text{états liés } |\chi_k\rangle} |\langle \chi_k | U(t_1, t_2) | \Phi_0 \rangle|^2 = \sum_{|\chi_k\rangle} \langle \Phi_0 | U(t_2, t_1) | \chi_k \rangle \langle \chi_k | U(t_1, t_2) | \Phi_0 \rangle. \quad (4.57)$$

Pourtant, il faut insister sur le fait que cette expression n'est adaptée au problème que quand la symétrie du problème physique reste dominée par le potentiel Coulombien et non pas par celle associée au champ externe (cylindrique). Dans le cas contraire, un classement en états liés et continuum *atomique* n'a plus vraiment de sens, on a plutôt des états "habillés" de l'atome qui ont un fort caractère d'électron libre et donc d'ondes planes. L'excursion moyenne Q de l'électron atomique dans un champ aussi fort pourra atteindre l'ordre de la taille ($\simeq n^2$) de l'atome ou même plus, et une définition dans l'image des états non perturbés telle que (4.57) prédira des fortes oscillations du signal d'ionisation $P_{\text{ion}}(t)$ à la période de la perturbation. De telles oscillations ne disent rien sur la vraie probabilité d'ionisation mais expriment plutôt la brisure de la symétrie atomique et donc la faillite de l'image intuitive qui nous a amenés à (4.57). L'équation (4.57) ne peut donc être utilisée que dans le régime des champs modérés, par exemple pour les atomes de Rydberg irradiés par un champ micro-onde.

L'expression (4.57) n'évalue que des éléments de matrice de l'opérateur d'évolution entre des états liés, qui sont donnés par l'Eq. (4.50) pour $t_2 > t_1$, ou par son équivalent complexe conjugué pour $t_2 < t_1$. Si l'on prend en compte que l'état initial $|\Phi_0\rangle$ ainsi que l'état final $|\chi_k\rangle$ pouvant être choisis avec des fonctions d'onde radiales réelles, cela nous laisse avec:

$$P_{\text{lié}} = \sum_{\substack{|\chi_k\rangle, i, j \\ K_1, K_2, K_3, K_4}} e^{-i\varepsilon_i(t_2-t_1)} e^{-i\varepsilon_j^*(t_1-t_2)} e^{iK_1\omega t_1} e^{-iK_2\omega t_2} e^{-iK_3\omega t_1} e^{iK_4\omega t_2} \times \langle \overline{\psi_{i\theta}^{K_2}} | R(\theta) | \chi_k \rangle \langle \overline{\psi_{i\theta}^{K_1}} | R(\theta) | \Phi_0 \rangle \langle \overline{\psi_{j\theta}^{K_4}} | R(\theta) | \chi_k \rangle \langle \overline{\psi_{j\theta}^{K_3}} | R(\theta) | \Phi_0 \rangle, \quad (4.58)$$

une expression entièrement générale.

Elle peut être encore simplifiée en moyennant la probabilité sur un cycle du champ externe, en parfait accord avec les expériences réelles actuelles [10, 8, 32]. Le temps d'interaction dans toutes les études expérimentales sur les atomes de Rydberg en champ micro-onde n'est défini qu'en moyennant sur la phase du champ vu par les atomes. De plus, les atomes interagissent avec la micro-onde pendant un temps qui est beaucoup plus long qu'une seule période du champ (quelques centaines de cycles typiquement). Sous cette hypothèse, nous pouvons moyenner (4.58) sur t_1 et t_2 , en tenant $t_2 - t_1$ constant. La somme sur $|\chi_k\rangle$ dans (4.58) contient des termes comme

$$\sum_{\text{état liés } |\chi_k\rangle, K} \langle \overline{\psi_{i\theta}^K} | R(\theta) | \chi_k \rangle \langle \overline{\psi_{j\theta}^K} | R(\theta) | \chi_k \rangle, \quad (4.59)$$

qui peut se récrire sous la forme

$$\sum_{\text{état liés } |\chi_k\rangle, K} \langle \overline{\psi_{i\theta}^K} | R(\theta) | \chi_k \rangle \langle \chi_k | R(-\theta) | \psi_{j\theta}^K \rangle. \quad (4.60)$$

Comme les états liés sont précisément les états pour lesquels l'action de l'opérateur de dilatation complexe $R(\pm\theta)$ est bien défini d'après (4.56), la somme se réduit finalement à la relation d'orthogonalité (4.47). Ainsi, l'effet de moyennner sur une période du champ consiste à *tuer* les interférences entre les différents états propres de Floquet (et ainsi les oscillations artificielles prévues ci-dessus dans le cas des champs intenses). Finalement on obtient pour la probabilité d'ionisation $P_{\text{ion}} = 1 - P_{\text{lié}}$ après un temps d'interaction $t = t_2 - t_1$ avec la micro-onde:

$$P_{\text{ion}}(t) = 1 - \sum_{i,K} \text{Re}(\langle \overline{\psi_{i\theta}^K} | R(\theta) | \Phi_0 \rangle^2) e^{2\text{Im}E_i t}, \quad (4.61)$$

où la somme s'étend sur toutes les composantes de Fourier des états propres dans une zone de Floquet.

Ce résultat est invariant de jauge, car une transformation de jauge se réduit à une transformation unitaire des états de Floquet $|\psi_{i\theta}\rangle$ qui agit indépendamment de la dilatation complexe. Il est donc en principe applicable sur toute la gamme d'intensités de champs qu'on puisse imaginer, contrairement à l'expression (4.57). Pourtant, ce premier résultat n'était pas non plus invariant de jauge et cela est une autre manière (plus formaliste) d'expliquer les effets marginaux anticipés plus haut.

Toutes les probabilités d'ionisation présentées dans ce mémoire seront donc déduites de (4.61), dans une base Sturmienne (4.17) et donc avec la substitution (4.51) dans les équations (4.57)-(4.61).

4.4.2 La dynamique des fonctions d'onde dans l'espace de configuration

Tandis que la probabilité d'ionisation est une quantité directement accessible aux expériences réelles, cela n'est pas vrai pour la dynamique de la densité électronique de la fonction d'onde du système considéré. Pourtant, nous allons voir pendant la suite de ce travail que la dynamique temporelle de la fonction d'onde permet d'obtenir des informations importantes sur le processus d'excitation et d'ionisation de l'atome par le champ extérieur (cf. 5.7, 6.2, 6.3). Nous nous sommes d'abord intéressés à la dynamique des fonctions propres du problème, c'est-à-dire des états de Floquet introduits dans la partie 4.1. Cette dynamique sera nécessairement périodique, à cause de (4.7), à la décroissance exponentielle $e^{-\Gamma t}$ vers le continuum près. Ensuite nous allons donner les expressions pour la dynamique d'une fonction d'onde initialement préparée dans un état lié, qui inclut des phénomènes d'interférence entre différents états de Floquet.

Nous commençons par la projection de l'évolution temporelle sur l'espace de configuration. D'après (4.12), un état propre de Floquet à l'instant $t_1 = 0$ est

donné par la somme sur ses composantes de Fourier $|\psi_p^K\rangle$:

$$|\psi_p(t=0)\rangle = \sum_K |\psi_p^K\rangle. \quad (4.62)$$

En posant $t_1 = 0$ et $t_2 = t \geq 0$, l'Eq. (4.50), ainsi que l'orthogonalité (4.47), fournit pour la densité électronique $|\langle \mathbf{r} | \psi_p(t) \rangle|^2$ dans l'espace de configuration:

$$\begin{aligned} |\langle \mathbf{r} | \psi_p(t) \rangle|^2 &= \sum_{\substack{j \ j' \ K_2 \ K_2' \\ K_1 \ K_1' \ K \ K'}} e^{-i(\varepsilon_j - \varepsilon_{j'})t} e^{-i(K_2 - K_2')\omega t} \\ &\times \langle \mathbf{r} | R(-\theta) | \psi_{j\theta}^{K_2} \rangle \langle \overline{\psi_{j'\theta}^{K_2'}} | R(\theta) | \mathbf{r} \rangle \langle \overline{\psi_{j\theta}^{K_1}} | R(\theta) | \psi_p^K \rangle \langle \overline{\psi_{j'\theta}^{K_1'}} | R(\theta) | \psi_p^{K'} \rangle = \\ &\sum_{\substack{j \ j' \ K_2 \ K_2' \\ K_1 - K \ K_1' - K'}} e^{-i(\varepsilon_j - \varepsilon_{j'})t} e^{-i(K_2 - K_2')\omega t} \langle \mathbf{r} | R(-\theta) | \psi_{j\theta}^{K_2} \rangle \langle \overline{\psi_{j'\theta}^{K_2'}} | R(\theta) | \mathbf{r} \rangle \\ &\times \left(\sum_K \langle \overline{\psi_{j\theta}^{(K_1 - K) + K}} | \psi_{p\theta}^K \rangle \right) \left(\sum_{K'} \langle \overline{\psi_{j'\theta}^{(K_1' - K') + K'}} | \psi_{p\theta}^{K'} \rangle \right) \stackrel{(4.47)}{=} \\ &e^{2\text{Im}\varepsilon_p t} \times \sum_{K_2 \ K_2'} e^{-i(K_2 - K_2')\omega t} \langle \mathbf{r} | R(-\theta) | \psi_{j\theta}^{K_2} \rangle \langle \overline{\psi_{j'\theta}^{K_2'}} | R(\theta) | \mathbf{r} \rangle. \end{aligned}$$

Comme la densité électronique est une probabilité, il faut encore prendre la partie réelle de cette expression:

$$|\langle \mathbf{r} | \psi_p(t) \rangle|^2 = \quad (4.63)$$

$$e^{2\text{Im}\varepsilon_p t} \times \text{Re} \left\{ \sum_{K_2 \ K_2'} e^{-i(K_2 - K_2')\omega t} \langle \mathbf{r} | R(-\theta) | \psi_{p\theta}^{K_2} \rangle \langle \overline{\psi_{p\theta}^{K_2'}} | R(\theta) | \mathbf{r} \rangle \right\}$$

Si l'on représente les états de Floquet dans notre base Sturmienne (4.17), cela devient, suite à la substitution (4.51)

$$|\langle \mathbf{r} | \psi_p(t) \rangle|^2 = \quad (4.64)$$

$$\begin{aligned} &e^{2\text{Im}\varepsilon_p t} \sum_{\substack{n \ l \\ n' \ l'}} \langle \mathbf{r} | n \ l \rangle \langle \mathbf{r} | n' \ l' \rangle \\ &\sum_{K_2 \ K_2'} \text{Re} \left\{ e^{-i(K_2 - K_2')\omega t} \langle \overline{\psi_{p\theta}^{K_2}} | R(\theta) 2r | n \ l \rangle \langle \overline{\psi_{p\theta}^{K_2'}} | R(\theta) 2r | n' \ l' \rangle \right\} = \\ &e^{2\text{Im}\varepsilon_p t} \times \left\{ \text{Re} \left[\sum_{K_2 \ n \ l} \langle \mathbf{r} | n \ l \rangle \langle \overline{\psi_{p\theta}^{K_2}} | R(\theta) 2r | n \ l \rangle \cos(K_2 \omega t) \right]^2 \right. \\ &\left. + \text{Re} \left[\sum_{K_2 \ n \ l} \langle \mathbf{r} | n \ l \rangle \langle \overline{\psi_{p\theta}^{K_2}} | R(\theta) 2r | n \ l \rangle \sin(K_2 \omega t) \right]^2 \right\}, \end{aligned}$$

où les $\langle \mathbf{r} | n \ell \rangle$ sont exactement les $S_{n\ell m}^\alpha$ de (4.17).

Dans ce résultat, ainsi que déjà dans l'équation (4.61) pour la probabilité d'ionisation, on voit clairement la relation entre la largeur Γ d'un état de Floquet $|\psi_p(t)\rangle$ et la partie imaginaire négative de sa valeur propre ε_p : La densité $|\langle \mathbf{r} | \psi_p(t) \rangle|^2$ a un comportement temporel qui est marqué par l'interférence des différents composantes de Fourier $|\psi_p^K\rangle$ de $|\psi_p(t)\rangle$, d'un côté, et d'une décroissance globale avec le terme $e^{2\text{Im}\varepsilon_p t}$, de l'autre côté. La largeur d'une résonance est donc donnée par

$$\Gamma = -2\text{Im}\varepsilon_p, \quad (4.65)$$

comme on l'a déjà mentionné plusieurs fois ci-dessus.

Pour l'évolution de la fonction d'onde d'un atome préparé à l'instant $t_1 = 0$ dans un état $|\Phi_0\rangle$ quelconque, l'équation (4.50) donne (avec $t_2 \rightarrow t$):

$$\begin{aligned} |\Phi(t)\rangle &= U(t) |\Phi_0\rangle = \\ &= \sum_{j, K_1, K_2} e^{-i\varepsilon_j t} e^{-iK_2 \omega t} R(-\theta) |\psi_{j\theta}^{K_2}\rangle \langle \overline{\psi_{j\theta}^{K_1}} | R(\theta) | \Phi_0 \rangle, \end{aligned} \quad (4.66)$$

dont on déduit pour la densité électronique

$$\begin{aligned} |\langle \mathbf{r} | \Phi(t) \rangle|^2 &= \\ &= \text{Re} \left\{ \sum_{\substack{j, K_1, K_2 \\ j', K_1', K_2'}} e^{-i(\varepsilon_j - \varepsilon_{j'}) t} e^{-i(K_2 - K_2') \omega t} \langle \overline{\psi_{j\theta}^{K_2}} | R(\theta) | \mathbf{r} \rangle \langle \overline{\psi_{j'\theta}^{K_2'}} | R(\theta) | \mathbf{r} \rangle \right. \\ &\quad \left. \times \langle \overline{\psi_{j\theta}^{K_1}} | R(\theta) | \Phi_0 \rangle \langle \overline{\psi_{j'\theta}^{K_1'}} | R(\theta) | \Phi_0 \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (4.67)$$

Dans ce cas on a donc en plus des interférences entre les différents états de Floquet qui ont un recouvrement suffisamment important avec l'état initial. Pour que ces interférences puissent avoir un effet important sur la dynamique de la fonction d'onde, les parties imaginaires des valeurs propres correspondant aux vecteurs propres interférant doivent être de même ordre de grandeur.

4.4.3 La distribution de Husimi du modèle unidimensionnel

Comme nous l'avons déjà discuté dans l'introduction (cf. 1.1.2) et dans la section 3.3, il y a un lien étroit entre l'excitation et l'ionisation d'un atome de Rydberg par une micro-onde et la dynamique classique irrégulière sous-jacente. Nous avons vu aussi que l'irrégularité de la dynamique classique peut être visualisée par une section de Poincaré (cf. 3.3) et que la dynamique quantique suivra (en moyenne) la diffusion classique en action sur une échelle de temps induite par

l'espacement moyen des états de Floquet, avant que la localisation dynamique ne se manifeste.

Suite à la structure typiquement mixte de l'espace des phases dans le cas du problème micro-onde (c'est-à-dire la coexistence de régions régulières et irrégulières), on peut pourtant s'attendre à des effets locaux sur les propriétés de transport quantique [56, 57] qui ne sont pas prévus par l'image statistique de la théorie de la localisation dynamique. On s'intéresse notamment à l'influence de certaines structures individuelles comme des cantores (cf. 1.1.2) sur l'excitation [51], en comparaison avec leur impact classique.

Pour établir cette comparaison, il nous faut une représentation de la densité électronique de l'atome dans les variables action-angle introduites au paragraphe 3.3.

Puisqu'il s'agit là d'une paire de coordonnées canoniquement conjuguées, celles-ci obéissent à une relation d'incertitude de Heisenberg. Afin d'obtenir une résolution optimale du transport de probabilité quantique projeté sur l'espace des phases classique, on choisit un ensemble d'états minimisant l'incertitude $\Delta I \Delta \Theta$ pour la décomposition de la fonction d'onde. Ces états sont connus sous le nom d'**états cohérents** et ils sont définis comme les vecteurs propres de l'opérateur

$$S_-^{(\alpha)} = S_1^{(\alpha)} - iS_2^{(\alpha)}, \quad (4.68)$$

où $S_1^{(\alpha)}$ et $S_2^{(\alpha)}$ sont les générateurs de $SO(2,1)$ introduit au chapitre 3.3 :

$$S_-^{(\alpha)} | I\Theta \rangle^{(\alpha)} = I e^{i\Theta} | I\Theta \rangle^{(\alpha)} \quad (4.69)$$

$S_-^{(\alpha)}$ peut être interprété comme opérateur de destruction permettant de descendre par une unité l'excitation le long de la coordonnée radiale d'un oscillateur harmonique à deux dimensions. La définition d'un état cohérent atomique est donc tout-à-fait analogue à celle des états cohérents d'un champ de radiation qui sont définis comme vecteurs propres de l'opérateur d'annihilation d'un photon [99]. Cette analogie est une conséquence naturelle de l'identification de l'atome d'hydrogène unidimensionnel avec un oscillateur harmonique à deux dimensions, d'un côté [66], et de l'équivalence d'un champ électromagnétique cohérent avec un oscillateur harmonique unidimensionnel, de l'autre côté [99]. Ainsi, les $| I\Theta \rangle$ ont aussi les propriétés caractéristiques d'un état cohérent:

- Les $| I\Theta \rangle$ forment une base surcomplète de l'espace de Hilbert.
- Les états cohérents ne sont pas orthonormaux.
- Les valeurs moyennes des observables prises sur les états cohérents obéissent aux équations classiques de mouvement, dans la limite semiclassique.
- Dans la limite semiclassique, les $| I\Theta \rangle$ représentent des paquets d'onde gaussiens minimums dans l'espace des phases.

La décomposition des $| I \Theta \rangle$ sur la base Sturmienne unidimensionnelle (4.30) est donnée par [66]

$$\langle I \Theta | n \rangle = \pi^{-1/4} \frac{e^{i(n-1)\Theta}}{\sqrt{n!(n-1)!}} I^{n-1/4} e^{-I}, \quad (4.70)$$

où $| n \rangle$ désigne la fonction Sturmienne $S_n^{(\alpha)}$. Par rapport à cette base, les états cohérents sont normalisés dans la limite semiclassique par

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\infty |\langle I \Theta | n \rangle|^2 dI d\Theta \simeq \frac{n}{n+1} \simeq 1, \quad n \rightarrow \infty. \quad (4.71)$$

La projection d'un état propre de Floquet $|\psi_p(t)\rangle$ sur l'espace des phases s'obtient donc à partir de (4.50), avec (4.51) et (4.70):

$$\begin{aligned} & |\langle I \Theta | \psi_p(t) \rangle|^2 = \quad (4.72) \\ & e^{2\text{Im}\varepsilon_p t} \sum_{\substack{n \ K \\ n' \ K'}} \text{Re} \left\{ e^{-i(K-K')\omega t} \langle I \Theta | n \rangle \overline{\langle I \Theta | n' \rangle} \right. \\ & \times \left. \langle \overline{\psi_{p\theta}^K} | R(\theta)2z | n \rangle \langle \overline{\psi_{p\theta}^{K'}} | R(\theta)2z | n' \rangle \right\} = \\ & e^{2\text{Im}\varepsilon_p t} \pi^{-1/2} I^{3/2} e^{-2I} \times \sum_{\substack{n \ K \\ n' \ K'}} \frac{I^{n+n'-2}}{\sqrt{n!n'(n-1)!(n'-1)!}} \\ & \times \text{Re} \left\{ e^{i(n\Theta - K\omega t)} e^{-i(n'\Theta - K'\omega t)} \langle \overline{\psi_{p\theta}^K} | R(\theta)2z | n \rangle \langle \overline{\psi_{p\theta}^{K'}} | R(\theta)2z | n' \rangle \right\} = \\ & e^{2\text{Im}\varepsilon_p t} \pi^{-1/2} I^{3/2} e^{-2I} \times \left\{ \text{Re} \left[\sum_{n \ K} \frac{\cos(n\Theta - K\omega t) I^{n-1}}{\sqrt{n!(n-1)!}} \langle \overline{\psi_{p\theta}^K} | R(\theta)2z | n \rangle \right]^2 \right. \\ & \left. + \text{Re} \left[\sum_{n \ K} \frac{\sin(n\Theta - K\omega t) I^{n-1}}{\sqrt{n!(n-1)!}} \langle \overline{\psi_{p\theta}^K} | R(\theta)2z | n \rangle \right]^2 \right\}. \end{aligned}$$

Comme I et Θ sont l'action et, respectivement, l'angle associés aux coordonnées semiparaboliques introduites dans le chapitre 3.1, (3.6), $|\langle I \Theta | \psi_p(t) \rangle|^2$ n'est plus normalisé par rapport au produit scalaire $\langle . | 2z | . \rangle$. On a plutôt

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\infty |\langle I \Theta | 2z | n \rangle|^2 dI d\Theta \stackrel{n \gg 1}{\simeq} \langle n | 4z^2 | n \rangle = 24\alpha^2 n^2, \quad (4.73)$$

dont la dernière égalité se déduit aisément de (4.32). Nous allons donc renormaliser $|\langle I \Theta | \psi_p(t) \rangle|^2$ dans tous nos calcul par la substitution

$$\langle I \Theta | n \rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{24\alpha n}} \langle I \Theta | n \rangle. \quad (4.74)$$

Pour l'évolution temporelle dans l'espace des phases d'un état initial quelconque $|\Phi_0\rangle$ on n'a qu'à utiliser le résultat correspondant dans l'espace de

configuration, Eqs. (4.66) et (4.67), en remplaçant dans la dernière équation $\langle \mathbf{r} |$ par $\langle I \Theta |$ et en utilisant (4.70) pour trouver la forme explicite.

La représentation (4.72) de la fonction d'onde compte parmi les **distributions de quasiprobabilité** d'une fonction d'onde et a été introduite par Husimi, d'où la dénomination de **distribution de Husimi**. Dans le contexte de l'optique quantique, elle est aussi connue sous le nom de **distribution Q** ou **distribution de Glauber** [123].

4.5 Réalisation numérique

Avant de présenter les résultats numériques que nous avons obtenus à l'aide des méthodes décrites ci-dessus, nous allons brièvement exposer *comment* ces méthodes s'implémentent dans un calcul "réel".

Nous esquissons notamment la dépendance de la convergence des résultats numériques avec les différents paramètres caractérisant la taille finie de la base Sturmienne et la dilatation complexe de l'Hamiltonien. Ces paramètres sont:

- n_{max} , la valeur maximale du nombre quantique n dans (4.17), qui joue le rôle du nombre quantique principal.
- α , le paramètre d'échelle de la base Sturmienne (4.17). Il définit la résolution des fonctions d'onde à représenter par la base Sturmienne, en \mathbf{r} et \mathbf{p} .
- K_{max} , l'ordre maximal dans la série de Fourier (4.12), c'est-à-dire le nombre maximal de photons échangés entre l'atome et le champ. Cette valeur mesure le nombre effectif de canaux d'ionisation qui génèrent le couplage au continuum pendant l'excitation par micro-onde.
- θ , l'angle de rotation de la dilatation complexe (4.41).

La recherche des valeurs et vecteurs propres de \mathcal{H}_θ s'effectue par la solution numérique d'un problème aux valeurs propres généralisé de type (4.23), défini par des matrices \mathcal{A} et \mathcal{B} complexes symétriques (cf. 4.2.1 et 4.3) *finies*, par conséquence de la troncature de la base infinie de l'espace de Hilbert. Comme résultat nous obtenons un spectre *discret* de quasiénergies de l'Hamiltonien tourné. A cause de l'emploi d'une base finie pour représenter notre système physique, il est impossible de générer des spectres continus tournés d'un angle -2θ par rapport à l'axe réel dans le plan complexe (cf. 4.3). En revanche, on obtient une série de valeurs propres voisines alignées approximativement le long d'une droite et formant un continuum effectif (fig. 4.7), issues d'un "seuil de continuum effectif" n_c^{sim} .

La figure 4.7 montre le spectre de l'Hamiltonien tourné (4.42) pour le modèle unidimensionnel (4.30) de l'atome. Dans ces conditions, le continuum tourné n'est pas dégénéré. En revanche, cela est le cas pour l'atome réel tridimensionnel, à cause du nombre quantique supplémentaire ℓ . Dans une base tronquée, cette dégénérescence est levée et on observe plusieurs "quasicontinua" issus d'un seul

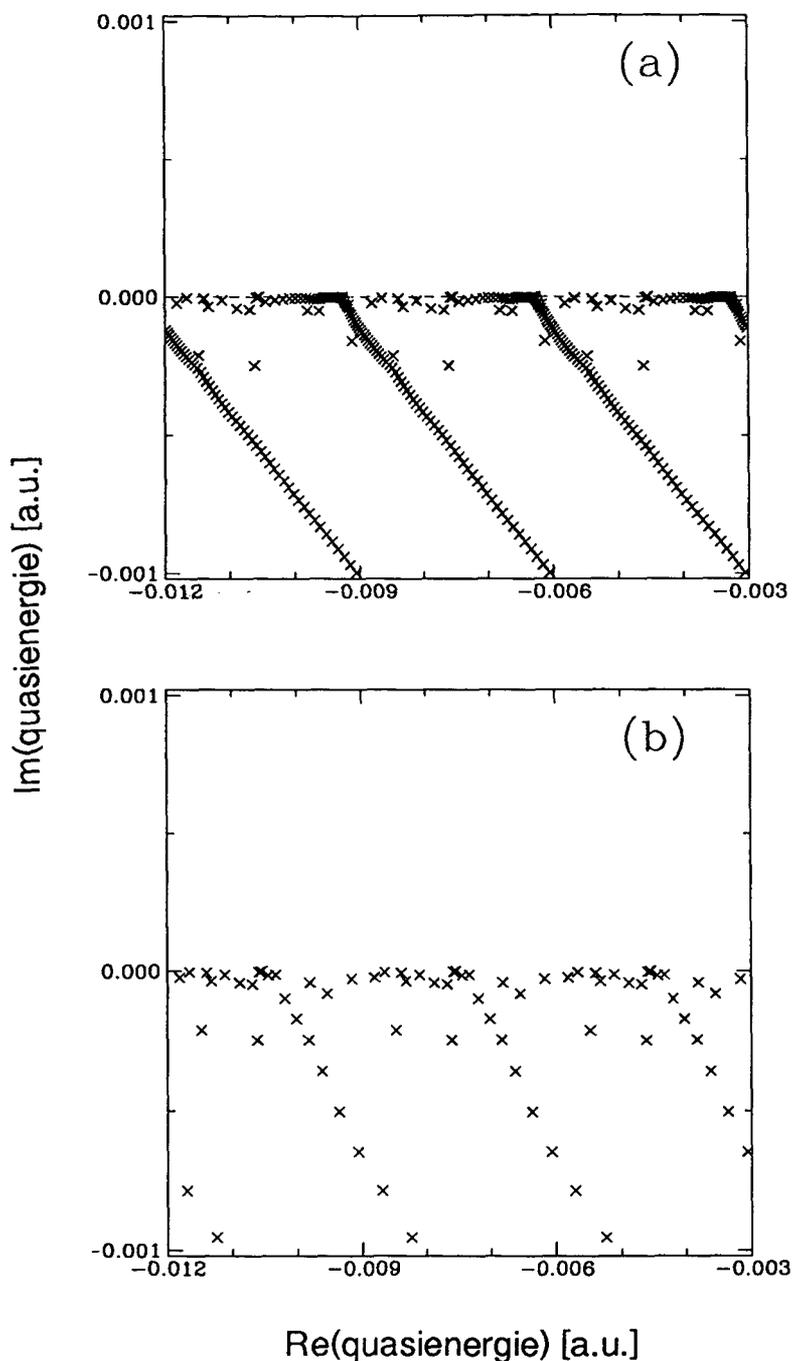


FIG. 4.7 - Spectre de l'Hamiltonien tourné \mathcal{H}_θ (eq. 4.42) d'un atome d'hydrogène (unidimensionnel) dans un champ de micro-onde, obtenu par la diagonalisation numérique dans une base Sturmienne (4.30) tronquée. En conséquence de la taille finie de la base, les continua sont discrétisés et apparaissent comme une ligne de valeurs propres discrètes. De plus, il y a un décalage du seuil de continuum vers des énergies plus basses. Cela définit un seuil de continuum effectif n_c^{sim} (comparable à celui des expériences n_c^{exp} [8, 10, 32]) qui dépend de la taille de la base. (a) $F = 1 \times 10^{-4}$ a.u., $\omega = 3 \times 10^{-3}$ a.u., $\theta = 0.13$, $\alpha = 8$, $n_{\text{max}} = 250$. Le décalage du seuil de continuum est petit. (b) Mêmes paramètres qu'en (a), sauf $n_{\text{max}} = 50$. Le décalage du seuil de continuum est beaucoup plus important.

seuil de continuum effectif n_c^{sim} . La figure 4.8 montre comment ce fait complique l'allure du spectre dans le plan complexe.

Un des avantages majeurs de la dilatation complexe (4.41) est la séparation des continua effectifs de l'axe réel. Par conséquent, l'effet de sa discrétisation est négligeable tant que l'écart entre deux valeurs propres voisines est petit devant leurs largeurs. Avec une base suffisamment grande, ceci peut être réalisé pour tout énergie à l'exception du voisinage immédiat du point de branchement du continuum : une matrice finie ne peut pas représenter correctement la série infinie de Rydberg près du seuil d'ionisation [118]. Sans rotation complexe, le continuum discrétisé est localisé le long de l'axe réel et interagit fortement avec les résonances, ce qui demande une taille de la base numérique beaucoup plus importante pour obtenir des résultats numériques convergés.

A part le continuum discrétisé, le spectre obtenu par diagonalisation numérique est composé de valeurs propres complexes discrètes (cf. 4.3). Une fois découvertes par la rotation des continua (4.41), leurs positions sont indépendantes de l'angle de rotation sur un certain intervalle de θ . Quand la taille de la base Sturmienne est accrue, les valeurs propres convergent vers la position de la résonance exacte et la taille de l'intervalle de convergence de θ aggrandit.

D'un point de vue pratique, les valeurs propres avec une partie imaginaire importante (y comprises celles des continua discrétisés) fournissent des contributions à la probabilité d'ionisation (4.61) qui saturent après un temps très court et ne jouent ainsi qu'un rôle négligeable sur une échelle de temps expérimentale de typiquement quelques centaines de périodes du champ externe. De plus, nous avons observé que les éléments de matrice correspondants dans (4.61) sont très petits. Par conséquent, seulement les états propres avec un taux d'ionisation relativement faible et un recouvrement important des vecteurs propres associés avec l'état initial contribuent de manière non-négligeable à la dynamique de notre système. Nous avons observé que ces valeurs propres convergent plus vite que celles avec des taux d'ionisation importants. En d'autres termes, la probabilité d'ionisation converge beaucoup mieux que les résonances individuelles.

Dans tous nos calculs nous avons soigneusement contrôlé la convergence de la probabilité d'ionisation par rapport à l'angle de rotation θ (4.41), le paramètre d'échelle α de la base Sturmienne (4.17), la taille de la base Sturmienne n_{max} , et le nombre de "blocs de photons" K_{max} inclus dans le calcul numérique.

Il existe en fait un test simple et efficace de la convergence des résultats numériques. Si l'on utilise les états propres de l'Hamiltonien tourné (4.42), la probabilité d'ionisation devrait être zéro à $t = 0$. Dans le calcul de cette quantité à partir de (4.61), rien n'assure ce résultat. On observe, en fait, que $P_{\text{ion}}(t = 0)$ peut prendre des valeurs non-nulles si la taille de la base (en n_{max} ou K_{max}) est trop petite ou si θ ou α ne sont pas bien choisis.

Ce critère simple est très utile en pratique, bien qu'il ne soit probablement pas suffisant pour assurer la convergence. Un phénomène similaire a été observé dans le calcul de la section efficace de photoionisation d'atomes en champs statiques

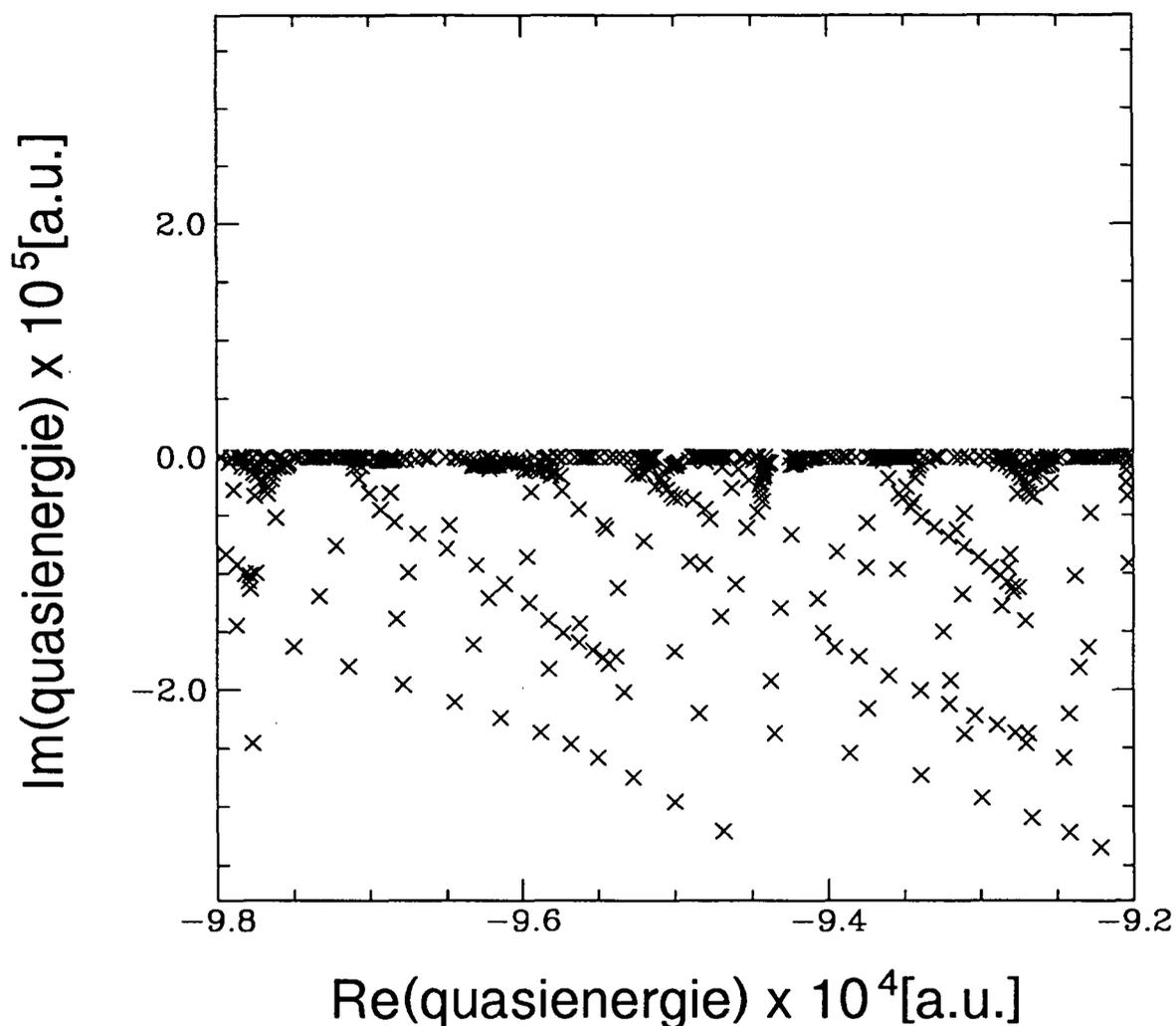


FIG. 4.8 - Spectre de l'Hamiltonien tourné (4.42) d'un atome d'hydrogène réel (tridimensionnel) dans un champ micro-onde. Suite à la brisure de la dégénérescence des continua par rapport au nombre quantique ℓ (induite par la taille finie de la base employée pour la diagonalisation numérique), il y a plusieurs "quasicontinua" issus du même seuil de continuum effectif n_c^{sim} . Il en résulte une structure nettement plus compliquée du spectre dans le plan complexe, par rapport au modèle unidimensionnel de l'atome (cf. fig. 4.7). $F = 9.648336 \times 10^{-8}$ a.u., $\omega = 4.99712337 \times 10^{-5}$ a.u., $\theta = 0.06$, $\alpha = 22.1$, $n_{\text{max}} = 75$.

[118] où l'on peut obtenir des valeurs négatives de la section efficace pour une taille insuffisante de la base.

Comme nous l'avons mentionné ci-dessus, la base finie utilisée pour la simulation numérique ne peut pas reproduire la série infinie de Rydberg auprès du seuil de continuum. Cela n'est pas très important en pratique, car aussi dans les expériences [8, 10, 32] l'ionisation ne peut pas être distinguée d'une excitation d'états de Rydberg suffisamment élevés (cf. 5.2). Toutes les expériences décrites dans la littérature [8, 10, 32] comprennent par "ionisation" les deux derniers processus d'excitation *ensemble*.

De même pour nos simulations numériques : L'énergie du seuil de continuum effectif peut être estimée par la valeur du potentiel Coulombien à la distance maximum du noyau engendrée par la base Sturmienne tronquée [118],

$$\frac{1}{2\alpha n_{\max}}.$$

Cela définit le seuil de continuum effectif par

$$n_c^{\text{sim}} \simeq \sqrt{\alpha n_{\max}}. \quad (4.75)$$

Dans le spectre de l'Hamiltonien tourné ce seuil effectif se manifeste par un décalage des continua discrétisés vers des énergies plus basses (cf. fig. 4.7 (b)). En changeant α et n_{\max} , on peut s'approcher dans la simulation numérique aux seuils effectifs n_c^{exp} des expériences. Nous avons vérifié que les énergies complexes des résonances ne changent pas avec un changement de n_c^{sim} , sauf quand ils sont approchées par un quasi-continuum.

De tels passages correspondent à l'ouverture d'un canal d'ionisation supplémentaire et peuvent produire des résultats non convergés. Un léger changement des paramètres (α , n_{\max} ou θ) permet de contourner de telles instabilités, qui peuvent aussi se produire suite au changement d'un paramètre physique tel que l'amplitude (réduite) du champ micro-onde. La figure 4.9 montre l'effet d'un passage d'une résonance par un continuum effectif (induit par un changement de l'amplitude de la micro-onde) sur les parties réelles et imaginaires des valeurs propres. On voit que l'effet est très localisé en F_0 et qu'il induit une discontinuité brutale dans les deux aspects du spectre. Un faible changement de α de $\alpha = 64.1$ (fig. 4.9) à $\alpha = 62.1$ (fig. 5.15 (b) et (c)) permet d'éviter cette instabilité.

La figure 4.10 montre P_{ion} obtenue à partir du spectre de la figure 4.9 (trait pointillé) et, respectivement, de la figure 5.15 (b) et (c) (trait continu). Sur cette figure, la discontinuité des niveaux de quasiénergie à $F_0 \simeq 0.04$ observée sur la figure 4.9 a été supprimée. Ainsi, cette figure 4.10 fournit une estimation pour l'incertitude globale de nos résultats numériques, sur tout l'intervalle de F_0 .

Le décalage du seuil du continuum induit par (4.75) peut être plus grand que ω (cf. fig. 4.7). Cela implique que le nombre de photons nécessaire pour l'ionisation effective de l'électron de Rydberg est diminué. Pourtant, cela n'affecte en général pas trop la probabilité d'ionisation, tant que le nombre de photons reste grand

devant un : c'est surtout l'absorption des premières photons qui détermine la dynamique du processus d'ionisation [33].

En conséquence de (4.61) on n'a besoin que d'une zone de Floquet du spectre de \mathcal{H}_θ pour calculer la probabilité d'ionisation. Typiquement, cela correspond au calcul d'une petite fraction des valeurs propres, de l'ordre de 1% à 10%. Ce pourquoi, nous avons utilisé l'algorithme de Lanczos [124] pour la solution de notre problème aux valeurs propres généralisé (4.23), avec des matrices \mathcal{A} et \mathcal{B} bandes complexes symétriques creuses. Cet algorithme permet le calcul de quelques valeurs propres autour d'une valeur initiale arbitraire, sans consommer trop de mémoire et/ou temps CPU.

Nous avons utilisé une version stable de cet algorithme [125] qui avait été développée essentiellement pendant l'étude de l'atome d'hydrogène dans un champ magnétique intense [118] et de l'atome de hélium [126]. L'algorithme fournit les valeurs propres complexes et la décomposition des vecteurs propres sur la base Sturmienne. L'expansion de l'état initial dans cette base [95] ainsi que les éléments de matrice de l'opérateur de la dilatation complexe $R(\theta)$ (4.56) impliquent des fonctions hypergéométriques. Ils peuvent être calculés en employant le groupe dynamique $SO(4, 2)$ de l'atome d'hydrogène [66]. Les coefficients d'expansion et les parties imaginaires des résonances permettent finalement le calcul de la probabilité d'ionisation en fonction du temps, d'après (4.61).

Pour finir ce chapitre, nous indiquons quelques valeurs typiques des paramètres numériques utilisés dans nos simulations, bien qu'elles puissent changer considérablement dans des situations physiques exceptionnelles.

Le paramètre d'échelle α de la base Sturmienne est toujours choisi proche du nombre quantique principal de l'état initial de l'atome. Ceci garantit que la base représente bien l'état initial et les états voisins.

L'angle de rotation est de l'ordre de $\theta \simeq 0.03 \dots 0.1$, pour les valeurs de n_0 ($\simeq 20 \dots 60$) employées dans la plupart de nos simulations. Cette valeur est nettement inférieure que les valeurs typiques pour la modélisation des états faiblement excités dans un champ de laser intense [6, 117, 127].

Pour le modèle unidimensionnel de l'atome, nous pouvons choisir n_0 au voisinage de 60, comme dans les expériences actuelles [8, 10, 32]. K_{\max} vaut de l'ordre de 10 et n_{\max} peut monter à des valeurs comprises entre 200 et 300. La taille de la matrice est ainsi de l'ordre de quelques milliers, et il y environ 500 valeurs propres dans une zone de Floquet. Pour la simulation de l'atome tridimensionnel, nous utilisons les lois d'échelle classiques (3.19) et choisissons $n_0 = 23$. Ainsi les valeurs de n_{\max} et de K_{\max} sont réduites. La taille de la matrice s'approche de quelques dizaines de milliers, avec environ 1000 valeurs propres dans une zone de Floquet. Pour cette valeur du nombre quantique principal et à une pulsation réduite $\omega_0 = 0.6$, la diagonalisation de l'Hamiltonien tourné demande tout l'espace mémoire d'un ordinateur CRAY2.

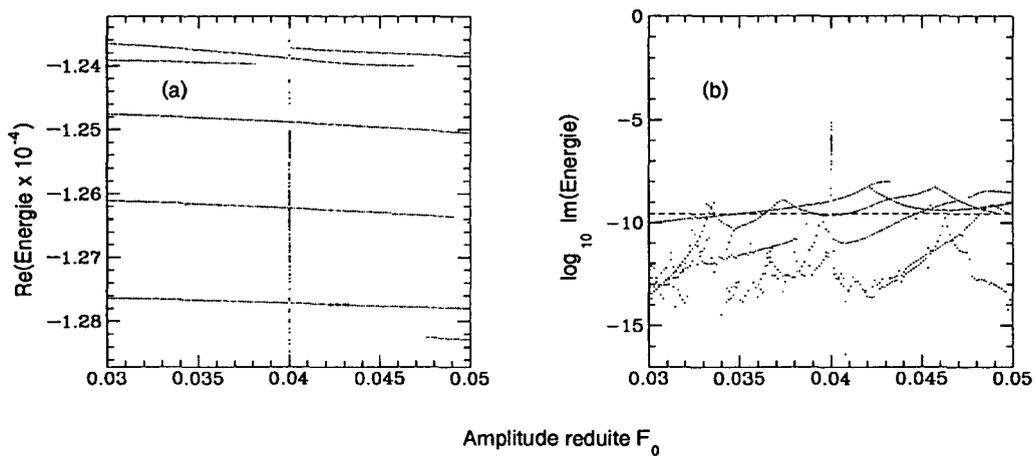


FIG. 4.9 - Parties réelles (a) et (b) des quasiénergies associées aux états de Floquet possédant un recouvrement $\geq 5\%$ avec l'état initial $|n_0 = 63\rangle$ (cf. fig. 5.15), en fonction de la pulsation réduite F_0 du champ micro-onde. $\omega/2\pi = 36.02$ GHz, $\alpha = 64.1$, $\theta = 0.03$, $n_{\max} = 280$, $K_{\max} = 23$. Induit par le changement de F_0 , il y a une discontinuité à $F_0 \simeq 0.04$, qui correspond au passage d'un continuum effectif auprès d'une (ou d'une famille de) résonance(s). Le choix d'une valeur de α légèrement différente permet de contourner cette instabilité, comme on le voit sur la figure 5.15 (b) et (c) (avec les mêmes valeurs de θ , n_{\max} et K_{\max} , mais $\alpha = 62.1$).

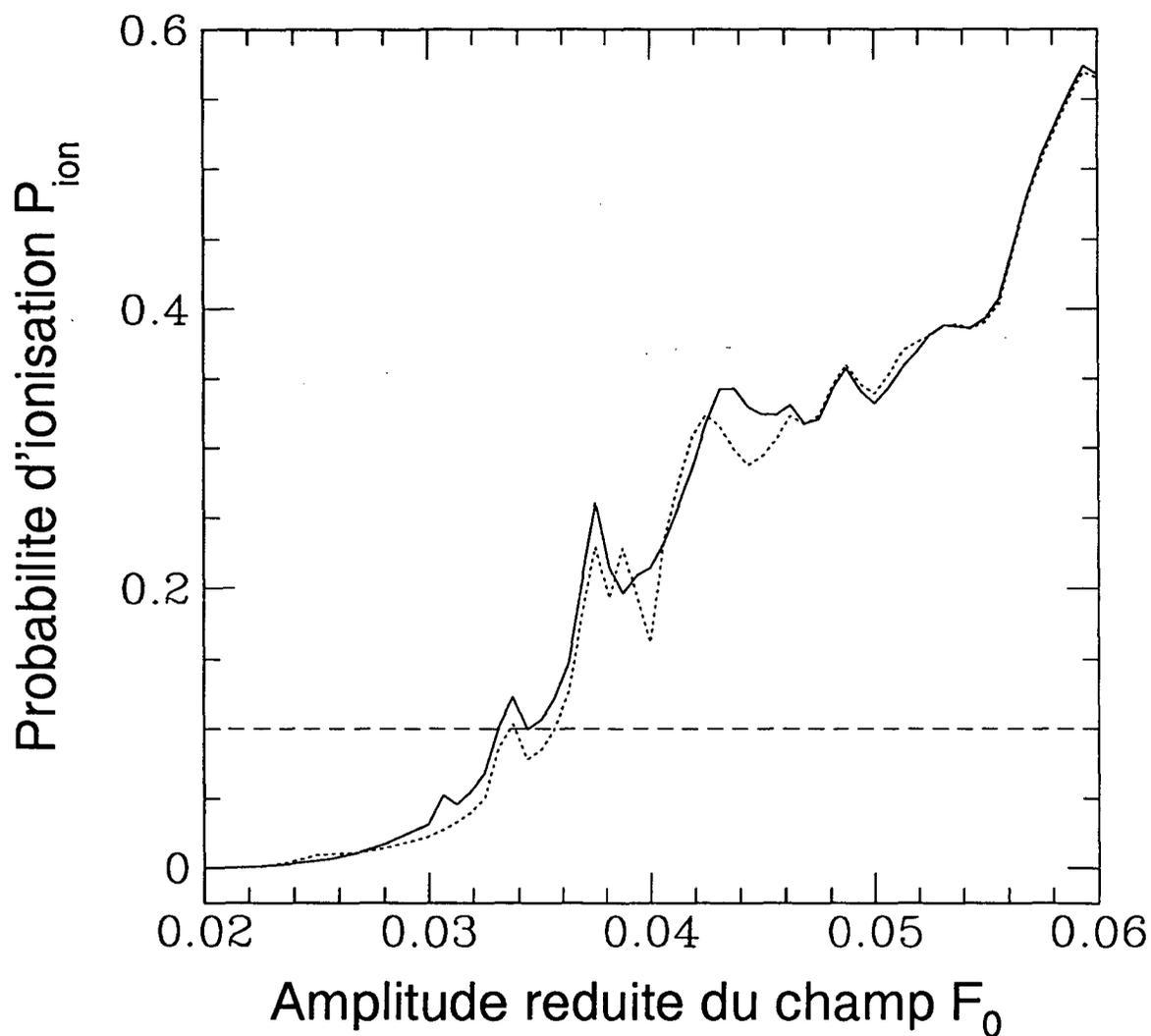


FIG. 4.10 - Probabilité d'ionisation de l'état $|n_0 = 63\rangle$ obtenue à partir des spectres de la figure 4.9 ($\alpha = 64.1$; trait pointillé) et de la figure 5.15 ($\alpha = 62.1$; trait continu). La discontinuité observée à $F_0 \simeq 0.04$ sur la figure 4.9 a été supprimée. La figure permet une estimation de l'incertitude de nos résultats numériques.

Troisième partie
Simulations Numériques

Der Weisheit erster Schritt ist: alles anzuklagen, der letzte: sich mit allem zu vertragen.

Georg Christoph Lichtenberg, *Sudelbücher*.

Nous avons maintenant à notre disposition tous les moyens techniques nécessaires pour simuler l'interaction d'un atome d'hydrogène avec un champ oscillant extérieur (cf. chapitre II). La présente partie, étant la partie principale de ce rapport, sera divisé en deux chapitres.

Dans une première étape (cf. chapitre 5), nous étudierons le modèle unidimensionnel d'un atome exposé à une micro-onde. Des modèles similaires ont déjà été employés par d'autres auteurs afin d'interpréter les expériences qui ont été effectuées dans le domaine micro-onde. Nous allons comparer nos résultats à quelques-unes de ces études, ainsi qu'aux résultats expérimentaux publiés.

Dans le deuxième chapitre (6), nous présenterons les résultats obtenus à partir du modèle "réaliste" de l'atome, donc d'une simulation sans restriction sur la dimensionnalité de l'espace des phases accessible à l'électron de Rydberg. Après une comparaison avec l'approche unidimensionnelle (cf. 6.1) on exploitera la flexibilité de notre méthode et on décrira les caractéristiques principales de l'excitation de l'atome tridimensionnel (cf. 6.2). A la lumière de ces résultats, une discussion de la situation expérimentale actuelle (cf. 6.2.4) dans le domaine micro-onde suivra. Nous étudierons enfin la dynamique d'un atome tridimensionnel dans le régime optique (cf. 6.3) et notamment la stabilisation adiabatique (cf. 2) et conclurons avec la révélation d'un trait commun aux deux régimes de paramètres physiques.

Chapitre 5

L'atome de Rydberg unidimensionnel

L'hypothèse fondamentale de toutes les études de l'excitation et de l'ionisation d'un atome de Rydberg exposé à une micro-onde consiste dans l'“unidimensionalité” essentielle de ce processus [7, 31, 38, 39]. Par conséquent, le gros de ces études [8, 10, 28, 33, 35, 40] part tout de suite d'un modèle de l'atome avec un seul degré de liberté, et seulement quelques-unes ont entrepris de tester ce modèle en l'opposant à la dynamique non-restreinte [31, 38, 39], pour quelques valeurs précises des paramètres physiques.

Les différentes approches unidimensionnelles aboutissent souvent à des images différentes, mais pas nécessairement contradictoires, pour l'explication des résultats expérimentaux, suite aux diverses approximations au-delà de l'unidimensionalité effective de l'excitation atomique.

Une première étape sur notre chemin vers une description générale et “exacte” des propriétés du transport quantique dans ce domaine sera ainsi une simulation de l'excitation et de l'ionisation d'un atome de Rydberg unidimensionnel, sans aucune autre approximation. D'un côté, cela permettra la comparaison et la “refocalisation” des différents modèles 1D, par la *première* étude qui prend en compte tous les différents aspects de la dynamique. De l'autre côté, c'est la préparation nécessaire à l'incorporation des approches unidimensionnelles dans le cadre général d'une dynamique non restreinte. La *seule* différence entre nos simulations uni- et tridimensionnelles sera en fait le degré de liberté atomique de plus, et la description de tout autre aspect restera strictement identique.

Nous commencerons donc par une courte revue du développement expérimental et théorique de l'étude de l'ionisation d'un atome de Rydberg par une micro-onde.

Nous essayons de prendre en compte toutes les contributions importantes sur ce sujet, mais nous serons sélectifs dans le poids que nous leur donnerons, à la mesure des priorités que nous poursuivrons pendant la suite de ce travail. Ce choix de priorités est un choix subjectif. Il n'est pas une conséquence d'une limitation quelconque de notre méthode, mais plutôt de délais temporels finis et de la perception actuelle du sujet par l'auteur.

5.1 Les différents points de vue

Au cours des expériences sur l'ionisation ou l'excitation d'un état de Rydberg par un champ micro-onde qui ont été initiées par le travail de Jim Bayfield et Peter M. Koch en 1974 [9], un très grand nombre de données expérimentales ont été accumulées [8, 10, 31]. Celles-ci montrent une richesse et une complexité aussi étonnantes que stimulantes, aussi bien pour les expérimentateurs que pour les théoriciens.

Afin de comprendre la dépendance globale des phénomènes observés vis-à-vis des différents paramètres externes (c'est-à-dire définissant la perturbation), on a d'abord essayé de réduire le système physique à un modèle aussi simple que possible. Cette approche est largement due aux travaux théoriques [7, 16, 128, 129, 130] de Boris V. Chirikov, Joe Ford, Giulio Casati, Italo Guarneri, Felix Izraïlev, Dima L. Shepelyansky et Francesco Vivaldi, qui ont réussi à établir un lien entre un atome d'hydrogène préparé dans un état de Rydberg et l'**application standard** ("standard map")[128] et sa version quantifiée. Ainsi ils ont pu mettre en évidence la relation fondamentale entre, d'une part, la "métamorphose" de l'espace des phases classique d'une structure globalement régulière à une structure mixte (cf. 1.1.2 et 3.3), et d'autre part le seuil d'ionisation en fonction de l'amplitude de la perturbation externe typiquement observé dans les expériences.

Ce succès a été parmi les premières contributions qui évoquaient de manière relativement simple et univoque la pertinence d'un caractère irrégulier de la dynamique classique au niveau du monde quantique. Il a montré l'efficacité des notions de la dynamique classique non-linéaire et de ses homologues du domaine du "chaos quantique" (et la nécessité du développement de ces derniers étant encore en "status nascendi" à cette époque) dans la description des systèmes quantiques complexes. L'ionisation par un champ micro-onde devenait ainsi un représentant paradigmatique qui peut être étudié dans des conditions de laboratoire avec des moyens expérimentaux relativement modestes.

De plus, l'étude de l'application standard, puis de l'**application de Kepler** ("Kepler map") [39, 131], dans leurs versions quantifiées, a abouti à la prédiction d'un phénomène universel pour les systèmes non-autonomes qui, suite à son analogie avec la localisation d'Anderson, a été baptisé "localisation dynamique" ("dynamical localization") (cf. 1.1.1). Des calculs numériques précurseurs des nôtres [38, 39], ont souligné la fiabilité de cette prévision fondée sur l'approximation de la dynamique par des applications stroboscopiques, dans les limites cernés par un certain nombre d'hypothèses de départ. L'effet a finalement été confirmé expérimentalement par plusieurs groupes indépendants [8, 28, 31], dans des conditions expérimentales suffisamment différentes pour justifier l'attribut d'universalité.

Un autre phénomène universel, celui des "fluctuations de conductivité universelles", a été observé lors des études théoriques de l'application de Kepler [16]. Pourtant, son origine ainsi que sa persistance dans des systèmes réels sont toujours controversées [17, 18], et l'épreuve expérimentale n'a pas encore été achevée.

Cependant, les études de laboratoire de la localisation dynamique ont aussi révélé des phénomènes que nous appellerons ici “locaux” [10] dont l’explication a été au-delà de la portée de la théorie de la localisation dynamique de Chirikov et al. (cf. 1.1). Il a donc fallu employer des modèles plus détaillés. Cela impliquait une modélisation plus fine de l’atome d’hydrogène et la résolution consécutive de l’équation de Schrödinger avec le potentiel choisi. Comme la démarche théorique de Chirikov et al., ainsi que la démarche expérimentale, a été de préparer l’atome dans un état initial de haute excentricité, ce qui était certainement motivé par la simple facilité de traiter un objet avec un nombre de degrés de liberté aussi réduit que possible, les approches théoriques de “deuxième génération” suivaient cet exemple. Ces travaux ont été effectués par plusieurs groupes, avec des techniques et des objectifs relativement divers et plus spécialisés.

Ian Percival, Derek Richards et J. G. Leopold, qui avaient d’abord étudié le problème classique tridimensionnel, à l’aide de simulations Monte Carlo [100, 132], ont introduit la notion des “états essentiels” (“essential states”) [133] dans l’analyse de la dynamique quantique, ces états fournissant une base effective sur laquelle s’effectue le transport quantique. Ils ont ensuite traité le problème avec des méthodes semiclassiques [18], qui leur ont permis de prendre en compte le couplage au continuum.

Reinhold Blümel et Uzy Smilansky utilisaient une méthode fondée sur l’introduction des “memory kernels” qui consiste dans une projection de la dynamique quantique sur l’espace des états liés, en ne prenant en compte que les transitions lié-lié et lié-continuum (et en négligeant les transitions continuum-continuum). Ils analysaient leurs résultats par le moyen de la **fonction de largeur** (“width-function”) [33, 41]. Il s’agit là essentiellement d’une entropie [31] mesurant de manière plus immédiate la transition du régime régulier au régime irrégulier à partir de la fonction d’onde du système quantique. Cette mesure est plus directe que la mesure du seuil d’ionisation à 10% préféré dans la plupart des expériences. Le concept de largeur de la fonction d’onde dans une certaine base a de plus donné lieu à l’introduction de la notion des “états de fenêtre” (“window states”) [33] qui ont été identifiés par ces auteurs comme étant le lien de passage de l’électron pendant le processus d’ionisation.

R. V. Jensen, Bala Sundaram et M. Saraceno [36, 42] ont interprété certaines structures locales dans les résultats expérimentaux de Koch et al. [10, 28] avec des “cicatrices” (“scars”) de la fonction d’onde (cf. 1.1.2) engendrées par des orbites périodiques instables de l’espace des phases classique, en utilisant une combinaison d’un modèle unidimensionnel de l’atome mis dans une boîte (ainsi discrétisant le continuum par des “boxed continuum states”) [37] avec la projection de la fonction d’onde sur l’espace des phases à l’aide d’une représentation de Husimi.

Heinz-Peter Breuer, Martin Holthaus et Klaus Dietz ont enfin décrit l’interaction de l’atome avec le champ dans une base de Floquet et montré l’efficacité d’une telle approche pour l’étude des systèmes soumis à une perturbation périodique [35, 106]. Notamment, ils ont pu mettre en évidence l’impact éventuel des anticroisements entre les niveaux de quasiénergie sur le résultat expérimental.

tal. Finalement, ils ont établi l'importance des états de Floquet dans une théorie semiclassique [134] qui considère l'espace des phases de l'atome unidimensionnel, élargi par le temps et l'énergie comme deuxième paire de variable canoniques.

Notre but dans ce chapitre sera de présenter une étude numérique systématique de l'ionisation d'un atome de Rydberg unidimensionnel dans tous ses aspects expérimentaux et théoriques. En utilisant l'approche que nous avons exposé dans le chapitre précédent, nous n'avons, contrairement à tous les modèles mentionnés ci-dessus (à l'exception du travail de Bayfield et al. [8]), *aucun* paramètre libre pour la simulation de notre objet physique. Par les paramètres externes (qui caractérisent le champ) et internes (caractérisant l'état initial de l'atome) définissant la situation physique, le problème numérique est entièrement décrit.

Comme nous avons directement accès aux propriétés spectrales du système - y compris les largeurs et donc les durées de vie des résonances - nous allons associer les structures des signaux d'ionisation typiques avec certaines propriétés de la dynamique des niveaux (c'est-à-dire la dépendance des niveaux d'énergie avec un paramètre externe comme par exemple l'amplitude du champ micro-onde; "level dynamics") d'énergie *complexes* et en discuter la dépendance avec le temps d'interaction atome-micro-onde. Ce dernier problème de la dépendance temporelle de l'excitation atomique induite par un champ micro-onde nous semble un point central pour la compréhension du rôle des différentes échelles de temps dans ce système *non-autonome* bien qu'il n'ait pratiquement pas été soumis à une étude systématique jusqu'ici. Finalement, nous allons présenter quelques distributions de Husimi représentant certains états propres de Floquet du système et comparer qualitativement leur degré de localisation spatiale dans l'espace des phases avec la largeur de la résonance associée. Au cours de cet étude, nous allons revoir quelques hypothèses d'autres auteurs, notamment celle des cicatrices proposée par Jensen et al.[36, 42].

5.2 Une expérience typique

Une expérience qui a pour but l'ionisation d'un état de Rydberg par un champ micro-onde se compose typiquement - pendant la phase productive - des étapes suivantes:

1. Population d'un état de Rydberg $|n_0 \ell_0 m_0\rangle$ à partir de l'état fondamental, par excitation laser.
2. Exposition de l'état à un champ micro-onde de pulsation ω et d'amplitude F , où nous négligeons l'enveloppe de l'impulsion micro-onde (i. e. la variation temporelle de F), pendant un temps d'interaction t .
3. Analyse de l'ensemble d'atomes ou d'ions résultant de l'interaction, par exemple en comptant le nombre d'atomes qui ont "survécu" à l'interaction, par rapport au nombre d'atomes qui avaient été préparés dans l'état initial. Cela définit la probabilité d'ionisation pour les conditions prédéfinies.

4. Répétition des étapes 2 et 3 pour différentes valeurs de l'amplitude du champ, pour les mêmes valeurs des nombres quantiques de l'état initial, de la pulsation et du temps d'interaction.
5. Représentation de la dépendance de la probabilité d'ionisation en fonction de l'amplitude et extraction de la valeur critique F_c de l'amplitude qui est associée au "seuil d'ionisation". Dans la plupart des cas, on définit F_c par l'amplitude $F(10\%)$ qui correspond à un taux d'ionisation de 10%.
6. Répétition des étapes 2 à 4 pour différentes valeurs des paramètres caractérisant le champ, et du temps d'interaction, ainsi que des nombres quantiques définissant l'état de Rydberg initial.
7. Résumé des résultats obtenus dans un graphe qui montre la dépendance de F_c en fonction des différents paramètres, typiquement en unités réduites.

Dans notre expérience numérique, nous choisissons exactement la même démarche. Après avoir défini les paramètres externes et internes, nous "mesurons" d'abord la probabilité d'ionisation.

Dans les expériences réelles, on cherche à rentrer le plus loin possible dans le régime semiclassique, c'est-à-dire monter à des états de Rydberg de nombre quantique principal n_0 le plus élevé possible, avec les techniques qui sont devenues standard pendant la dernière décennie. La motivation en est, du côté théorique, l'intérêt de la comparaison de la dynamique classique avec celle du système réellement quantique, qui devraient se rapprocher dans la limite semiclassique. De plus, les états de Rydberg sont des états de grand intérêt expérimental [66] avec une durée de vie radiative τ_s qui croît comme le cube de n_0

$$\tau_s \sim n_0^3.$$

Ainsi, un état avec $n_0 = 50$ vit de l'ordre de 100 μs , ce qui est beaucoup plus long que par exemple sa durée de vie induite par un champ micro-onde externe typique. Par conséquent, pour de tels états, on peut négliger complètement leur décroissance radiative sur l'échelle de temps expérimentale. De plus, l'énergie étant proportionnelle à n_0^{-2} , la fréquence de transition ω_t entre deux états voisins suit la loi d'échelle

$$\omega_t \sim \frac{1}{n_0^3},$$

ce qui correspond à environ 50 GHz pour $n_0 = 50$, donc à une haute fréquence de micro-onde. Cela représente un autre avantage expérimental, car la technologie micro-onde est très bien maîtrisée depuis les efforts de la dernière guerre mondiale et des divers conflits suivants ... Le prix à payer est la polarisabilité statique très importante des états de Rydberg qui croît comme n_0^6 (!) et rend ces états très sensibles à des champs parasites qui sont toujours présents et assez difficiles à contrôler. Le compromis entre toutes ces contraintes a été établi autour des

valeurs de $n_0 \simeq 60$, ce qui implique des sources de micro-onde d'une largeur spectrale portant d'environ 5 à 40 GHz.

L'expérimentateur numérique ne souffre pas des champs parasites mais, en revanche, de la performance toujours limitée des ordinateurs souvent vendus sous la soit-disant appellation "super computer". Un état initial typiquement peuplé dans un laboratoire demande une longueur de la base Sturmiennne tridimensionnelle utilisée pour la simulation de l'interaction atome-champ qui est au-delà de la capacité de mémoire des ordinateurs les plus puissants actuellement disponibles. Cela n'est pas seulement du à la densité d'état croissant comme n_0^3 , mais aussi au nombre de photons N_0 (4.1) nécessaire pour arriver, à partir de l'état initial, au continuum. Pour une pulsation égale à la distance énergétique à l'état voisin (donc une pulsation réduite $\omega_0 = 1$), N_0 est égal à 30 (!) pour $n_0 = 60$.

Bien que nous soyons capables de réaliser les valeurs typiques d'une expérience réelle dans le modèle unidimensionnel (cf. 5.4.1), nous ne le sommes pas encore pour l'atome tridimensionnel (cf. 6.1). Nous allons donc présenter dans ce chapitre des résultats pour des valeurs expérimentales de n_0 , ainsi que pour des états moins excités qui permettront une comparaison au comportement de l'atome tridimensionnel. Les valeurs des paramètres choisies pour les états moins excités sont obtenues à partir des valeurs expérimentales par application des lois d'échelles classiques (3.19). Ainsi la dynamique classique de l'électron atomique est strictement la même pour les deux cas. Cela nous fournira une estimation sur la fiabilité des lois d'échelles (3.19) de l'Hamiltonien classique pour le système quantique.

Le nombre le plus important de données expérimentales sur l'ionisation des états de Rydberg de l'hydrogène atomique par un champ micro-onde a été accumulé par le groupe de Peter Koch à Stony Brook [10, 24, 29, 30].

L'enveloppe de l'impulsion de micro-onde est dans la plupart [10] de ses expériences plate pendant l'interaction, avec de courtes montées initiales et descentes finales de l'impulsion qui durent entre 50 et 100 périodes du champ [10, 132, 135]. La fréquence $\omega/2\pi$ de la micro-onde varie de 9 GHz à 36 GHz, et le temps d'interaction (c'est-à-dire la longueur de cette partie de l'impulsion de micro-onde qui à une amplitude de plus de 95% de l'amplitude maximale de l'impulsion [132]) est indiqué de 150 à 340 cycles de la perturbation [10, 132, 135]. La plupart des expériences ont été réalisées avec une fréquence de 36.02 GHz et un temps d'interaction d'environ 340 périodes du champ, avec une montée initiale et une descente finale (pris entre 5% et 95% de l'amplitude maximale; voir aussi la figure 4.1) d'environ 80 oscillations [10, 132]. Le nombre quantique principale est en général compris entre $n_0 = 57$ et $n_0 = 77$. A part la valeur de n_0 , l'état initial est en fait relativement mal défini dans ces expériences. Les auteurs le caractérisent comme étant une distribution microcanonique [132] sur la couche d'énergie, ce qui permet de parler d'un ensemble d'états initiaux qui exploitent toute la tridimensionalité de l'atome d'hydrogène. Dans ce sens, ce sont les seules expériences qui travaillent avec un état initial tridimensionnel, ou, plus précisément, qui ionisent des états $|n_0 \ell_0 m_0\rangle$ avec une valeur de ℓ_0 et de m_0 quelconque. Nous allons voir

que ce fait d'un état initial mal défini représente un désavantage notable pour l'interprétation univoque des résultats obtenus par ce groupe (cf. 6.2.4).

Pourtant, jusqu'ici tous les résultats ont été interprétés à partir de modèles unidimensionnels et cette approche semble avoir été assez efficace. Comme nos calculs négligent l'enveloppe de l'impulsion de la micro-onde et comme ils permettent d'explicitier la dépendance détaillée de la probabilité d'ionisation de l'état initial d'un atome d'hydrogène, nous avons choisi cette série d'études de laboratoire pour l'application de notre modèle. Tous les résultats que nous présenterons au cours de ce mémoire ont donc été obtenus pour des valeurs de t_0 , ω_0 et F_0 qui se rapprochent des valeurs utilisées par Koch et al., afin de tester à la fois la fiabilité de notre méthode et les interprétations de ces résultats fondées sur des modèles unidimensionnels.

5.3 Probabilité et seuil d'ionisation

Nous procédons maintenant à la discussion des résultats de nos simulations. Dans la présente partie traitant le modèle unidimensionnel de l'atome, nous ne sommes pas soumis à des limitations des capacités de calcul. Par conséquent, nous sommes capables à modéliser exactement les conditions expérimentales de Koch et al. [10, 24, 29, 30, 132].

Pourtant, comme dans nos simulations 3D (cf. 6), les capacités des ordinateurs ne nous permettront plus de prendre le nombre quantique principal n_0 égal aux valeurs expérimentales, nous étudions aussi ici le cas d'un atome moins excité, qui sera ensuite comparé aux résultats tridimensionnels (cf. 6.1). A cette valeur de n_0 nous pourrions de plus étudier en détail la dépendance des propriétés spectrales de notre système en fonction des paramètres externes (cf. 5.5).

5.3.1 La probabilité d'ionisation en fonction du temps d'interaction

Nous débutons avec nos résultats obtenus pour l'ionisation de l'état initial unidimensionnel $|n_0 = 23\rangle$, que nous comparerons plus tard avec les simulations de l'atome tridimensionnel (cf. 6.1). Pour reproduire aussi bien que possible les résultats expérimentaux de Koch et al. [28, 135], nous avons choisi un temps d'interaction de $t = 4.6 \times 10^{-10}$ s, obtenu à partir du temps expérimental $t = 9.1 \times 10^{-9}$ s par application des lois d'échelle classiques (3.19). La figure 5.1 montre la probabilité d'ionisation de l'état $|n_0 = 23\rangle$ exposé à un champ de pulsation $\omega_0 = 1.33$ et d'amplitude $F_0 = 0.05$, en fonction du temps d'interaction. Comme la phase du champ vu par les atomes n'est pas définie dans toutes les expériences actuelles [8, 10, 31], nous avons utilisé l'équation (4.61) qui donne la probabilité pour la phase moyennée.

Nous remarquons un aspect caractéristique de l'ionisation d'un atome de Rydberg préparé dans un état de grande excentricité: une décroissance significativement plus lente que prévue par la théorie de perturbations pour une simple

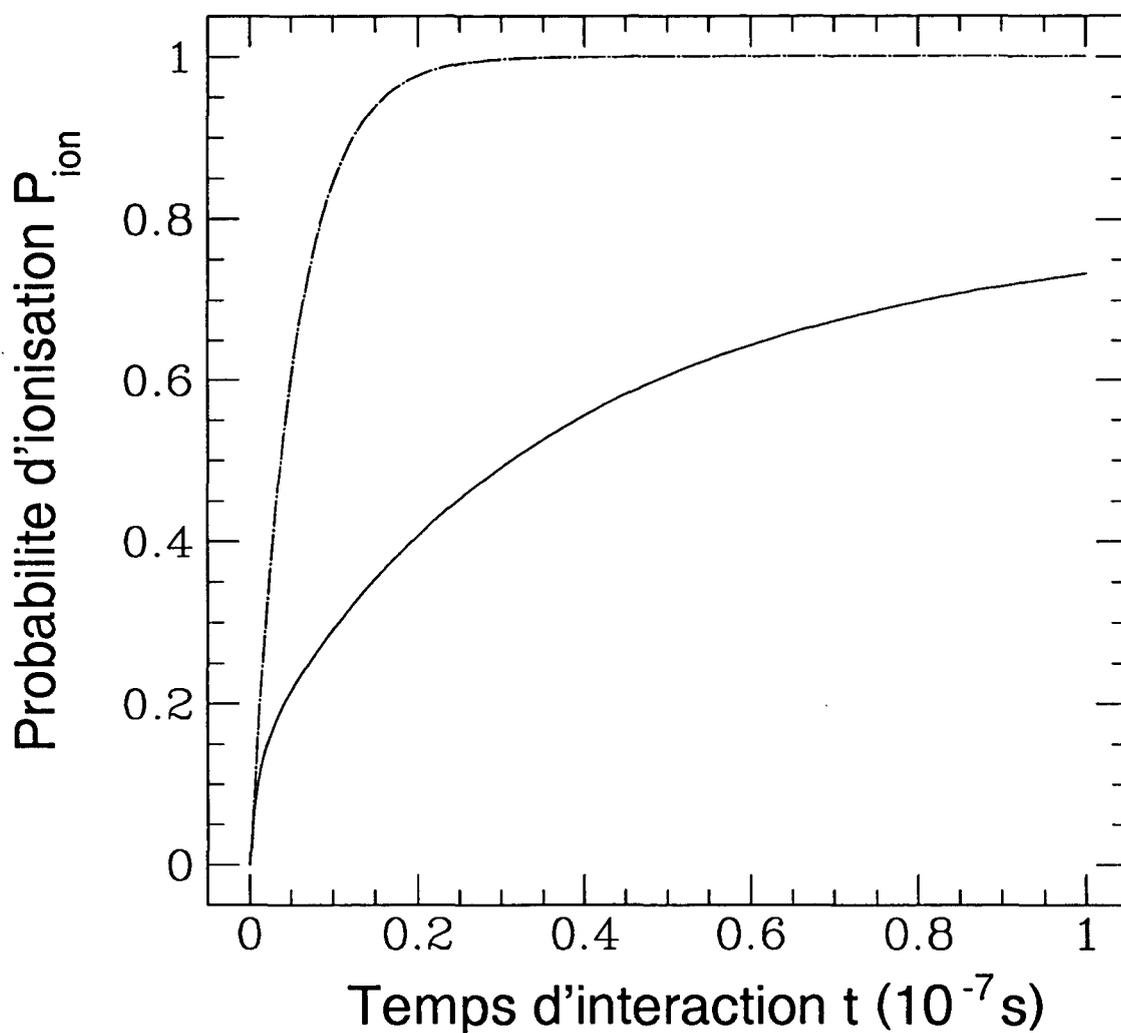


FIG. 5.1 - Probabilité d'ionisation de l'état $|n_0 = 23\rangle$ exposé à un champ micro-onde de pulsation réduite $\omega_0 = \omega n_0^3 = 1.33$ et d'amplitude réduite $F_0 = F n_0^4 = 0.05$, en fonction du temps d'interaction t (trait continu). La phase du champ a été moyennée et la courbe a été obtenue à partir de l'équation (4.61). Le trait pointillé montre une décroissance exponentielle avec le taux initial de la courbe continue. Le comportement nettement sous-exponentiel est une indication du caractère *non-perturbatif* du processus d'excitation atomique.

transition multiphotonique qui serait une exponentielle comme indiquée dans la figure par la courbe en trait pointillé. Quand le champ est suffisamment fort pour mélanger différents états de Floquet, l'équation (4.61) prévoit une décroissance multiexponentielle qui introduit toute une gamme d'échelles de temps différentes dans le processus d'ionisation. Après une décroissance pratiquement monoexponentielle pour des temps d'interaction très courts (qui est prolongée par l'exponentielle dessinée sur la figure 5.1), les états de Floquet correspondants ont été dépeuplés par le couplage au continuum et d'autres états avec une durée de vie plus longue dominant le processus. Le nombre d'échelles de temps différentes est d'autant plus grand qu'il y a beaucoup d'états de Floquet avec un grand recouvrement ($\geq 1\%$) avec l'état initial; cela induit une décroissance nettement non ou multi-exponentielle vers le continuum.

Nous verrons dans le chapitre 6.1 que les phénomènes observés sur la figure 5.1 sont tout-à-fait indépendants de la dimensionalité du modèle et donc de la dimensionalité de l'espace des phases accessible à l'électron, tant que l'atome est préparé initialement dans un état de haute excentricité.

Le mélange d'états de Floquet nous fournit d'ailleurs une définition adéquate pour ce que nous appellerons un "champ intense" dans le contexte de l'ionisation par micro-onde, comme il traduit l'irrégularité de la dynamique classique dans le domaine quantique. Cette définition est différente de celle utilisée dans le domaine des interactions des atomes faiblement excités avec des lasers intenses (cf. 2). Nous venons de voir que déjà une amplitude de micro-onde de $F_0 = 0.05$ peut fortement mélanger les états de Floquet, dans une situation où la symétrie Coulombienne reste intacte. Au contraire, dans le domaine optique, un champ intense *se définit* par la destruction de la symétrie Coulombienne et donc par la création d'un objet qui ne ressemble guère à un atome tel que nous en avons l'habitude.

5.3.2 La probabilité d'ionisation en fonction de l'amplitude du champ

Un calcul comme celui représenté à la figure 5.1 correspond à la brique de base d'une expérience réelle. On en obtient immédiatement la probabilité d'ionisation et on peut répéter la même mesure (diagonalisation) pour différentes valeurs de l'amplitude, avec tous les autres paramètres fixes.

On arrive ainsi à une représentation de la probabilité d'ionisation P_{ion} en fonction de l'amplitude F , ou de l'amplitude réduite F_0 telle qu'elle est montrée sur la figure 5.2. On en extrait le seuil d'ionisation suivant la valeur du taux X qu'on a choisie, ici et dans la plupart des expériences réelles $X = 10\%$. Dans ce cas, nous obtenons $F_0(10\%) = 0.0513$.

Une observation qualitative nous ramène à l'origine historique des expériences sur l'ionisation des atomes de Rydberg par un champ micro-onde (cf. chapitre 1.1.1): le processus d'ionisation montre de toute évidence un comportement de seuil, en fonction de l'intensité du champ, très marqué. C'est un comportement de type classique qu'on semble avoir écarté depuis la description de l'effet photo-

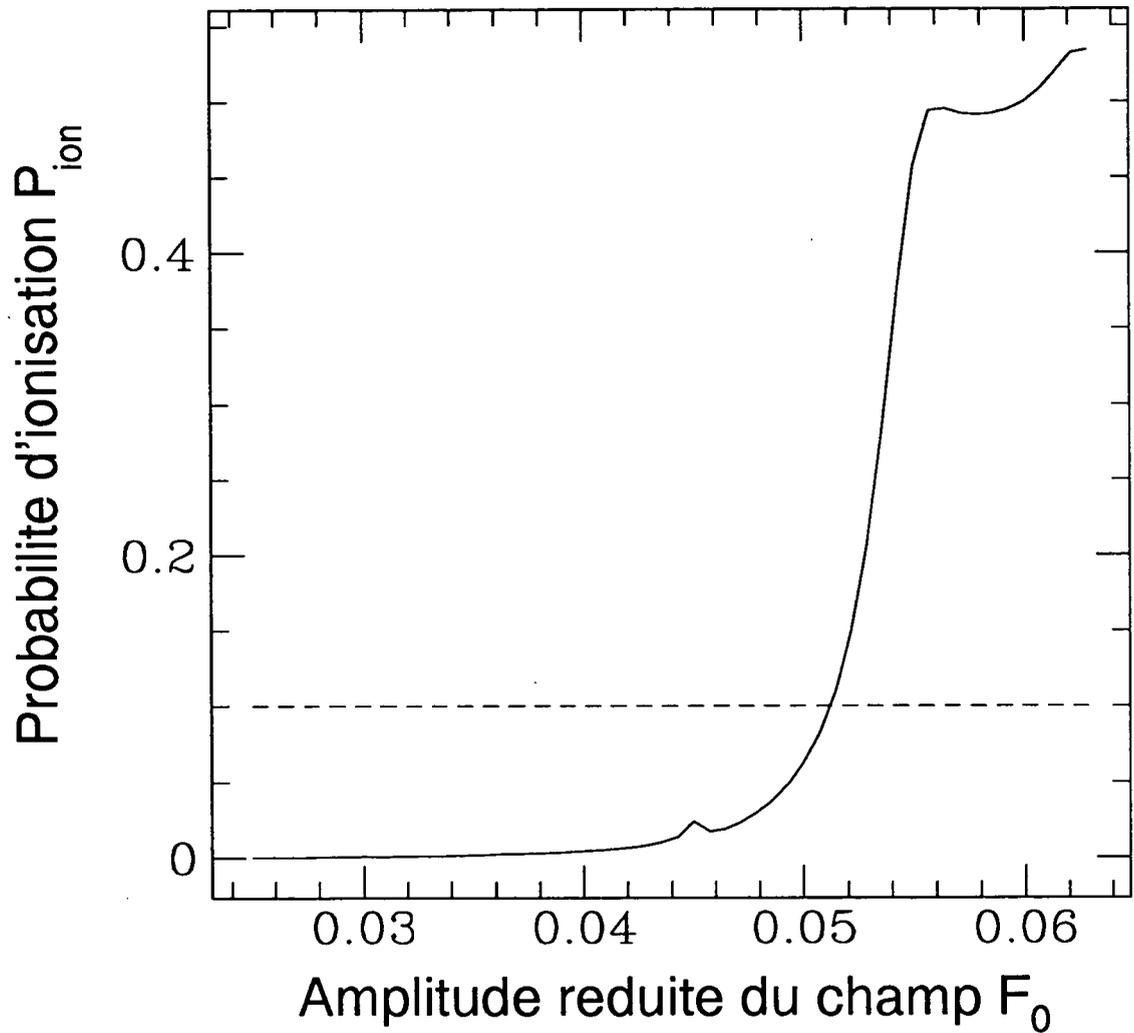


FIG. 5.2 - Probabilité d'ionisation de l'état $|n_0 = 23\rangle$ dans un champ micro-onde de pulsation réduite $\omega_0 = 1.33$, en fonction de l'amplitude réduite F_0 . Temps d'interaction: 4.6×10^{-10} s. Notons la croissance relativement abrupte de P_{ion} à partir d'une certaine valeur de F_0 . Le trait pointillé définit le seuil d'ionisation $F_0(10\%)$ à 10%. Ici on trouve $F_0(10\%) = 0.0513$.

électrique aux origines de la mécanique quantique. Si on se laisse guider par une image perturbative du processus d'excitation de l'atome, on s'attendrait plutôt à un comportement de seuil en fonction de *la fréquence* et donc à une ionisation très inefficace dans le domaine micro-onde, car une telle image prévoit un taux d'ionisation proportionnel à une puissance de l'amplitude du champ qui est égale à 2 fois l'ordre (multiphotonique) de la transition, c'est-à-dire au nombre de photons correspondant au potentiel d'ionisation de l'état initial. Pour des valeurs petites de F , ce taux *décroit* avec l'ordre de la transition.

De toute évidence, on se trouve donc ici dans un régime hautement non-perturbatif, ce qui a motivé l'interprétation du processus d'excitation dans nos conditions physiques comme "ionisation diffusivo" ou "chaotique". Cette terminologie est due au fait qu'une analyse de la dynamique classique de l'électron atomique montre une transition d'un espace des phases régulier à un espace des phases mixte ou irrégulier, pour des valeurs de l'amplitude de la perturbation comparables au seuil d'ionisation mesuré dans les expériences. Une dynamique classique irrégulière implique un transport diffusif de probabilité vers des actions élevées et justifie ainsi la dénomination qui a été choisie pour le processus quantique analogue, en opposition avec l'effet photoélectrique.

La nonlinéarité des équations du mouvement classiques permet donc d'obtenir des taux d'ionisation importants d'un objet quantique auxquels on ne s'attendrait pas du tout à partir d'une perception "régulière" de la mécanique quantique. Ainsi, cette observation a pris sa place parmi les justifications les plus pertinentes de l'intérêt de la quantification d'un système classique non-intégrable.

5.3.3 Le seuil d'ionisation en fonction de la pulsation du champ

En changeant ensuite la valeur de la pulsation réduite, on obtient un graphe typique qui représente la dépendance de $F_0(10\%)$ avec ω_0 . Grâce aux lois d'échelles classiques (3.19), on a deux options pour varier ω_0 : soit on fixe n_0 et balaye la pulsation ω , soit on fixe ω et excite différentes valeurs initiales du nombre quantique principal n_0 . Dans la plupart des expériences de laboratoire, on choisit la dernière option, afin de conserver exactement la même structure modale du champ micro-onde vu par les atomes.

Dans toutes ces études, le temps physique t est constant pour toutes les valeurs de n_0 , et on ne travaille donc pas à temps réduit t_0 constant. Cela implique que le nombre d'oscillations du champ vu par les atomes reste constant pour différents valeurs de n_0 et donc de ω_0 , tandis que le nombre de passages de l'électron au périhélie *décroit* quand n_0 croît.

Le choix le plus simple pour les simulations numériques est l'autre option: elle permet, d'après nos expériences, un contrôle plus aisé de la convergence des résultats, ce qui représente un avantage important vu la taille mémoire et le temps de calcul typiquement nécessaires. Elle présente aussi l'avantage de maintenir t_0 inchangé, et donc aussi le nombre de passages au périhélie, tandis que le nombre de périodes du champ vues par les atomes *croît* avec ω .

Nous avons donc d'abord choisi cette manière de balayer ω_0 , ce qui restreint légèrement la comparabilité immédiate de nos résultats avec les expériences de laboratoire. Cependant, nous allons aussi fournir une étude utilisant l'autre option "expérimentale" mentionnée ci-dessus, à la fin de ce chapitre (cf. 5.4.1).

La figure 5.3 montre la dépendance du seuil d'ionisation de l'état initial $|n_0 = 23\rangle$ avec la fréquence ω , en unités réduites. Le temps d'interaction est égal à $t = 4.6 \times 10^{-10}$ s, ce qui correspond à $t_0/2\pi = 249$ passages de l'électron au périhélie, pour tous les points de ce graphe.

Pour donner une indication des résultats expérimentaux typiques et du comportement prévu par la théorie de la localisation dynamique, nous avons encore dessiné la courbe expérimentale obtenue par Galvez et al.[28] à Stony Brook et la prédiction pour le seuil d'ionisation correspondant de Casati et al.[16]. Avant de discuter brièvement les différences entre ces trois courbes, nous constatons une propriété très importante qu'elles ont en commun: en moyenne, $F_0(10\%)$ est une fonction *croissante* de la pulsation réduite! A cause de l'équation (4.1), ceci veut dire qu'il faut *augmenter* l'amplitude *réduite* du champ quand le nombre de photons pour arriver au continuum *décroit*, encore un phénomène complètement contre-intuitif d'un point de vue inspiré par la théorie des perturbations. Il s'agit là d'une manifestation de la localisation dynamique qui a été prévue par Casati et al. (cf. 1.1.1, et qui a depuis aussi été mise en évidence dans des expériences réalisées par trois groupes indépendants[8, 28, 31]. L'importance du phénomène repose en effet sur la comparaison avec la dynamique classique du système, qui suggère un écart croissant avec ω_0 entre le seuil observé pour l'ionisation de l'atome quantique et celui définissant la transition de l'ordre au chaos dans le système classique. Ce dernier est en fait une fonction *décroissante* de ω_0 (cf. figure 1.1).

Comme le nombre de photons qui sépare l'état initial du continuum (4.1) peut également être exprimé par

$$N_0 = \frac{1}{2\omega n_0^2}, \quad (5.1)$$

on voit immédiatement que la diminution de N_0 peut aussi être interprétée comme augmentation de n_0 , ce qui correspond à la manière habituelle de changer ω_0 dans les expériences.

La courbe pointillée de la figure 5.3 représente les résultats publiés par Galvez et al.[28]. Dans cette expérience, n_0 a été changé de 45 à 80 et nous en avons reproduit ici les seuils de $n_0 = 57$ à $n_0 = 78$. La fréquence de la micro-onde était $\omega/2\pi = 36.02$ GHz et le temps d'interaction $t \simeq 9.1 \times 10^{-9}$ s.

Suite à la présence inévitable de champs parasites dans la zone d'interaction avec le champ oscillant ainsi que dans la zone de mesure de la probabilité d'ionisation, "l'ionisation expérimentale" est comprise comme excitation de l'électron atomique dans un état lié $|n\rangle$ avec $n > n_c$ (duquel il sera ionisé par les champs parasites) ou bien sa véritable transition vers un état libre du continuum atomique. On appellera n_c le "seuil de continuum effectif" ("experimental cut-off value"). Il est donc expérimentalement impossible de distinguer entre une excita-

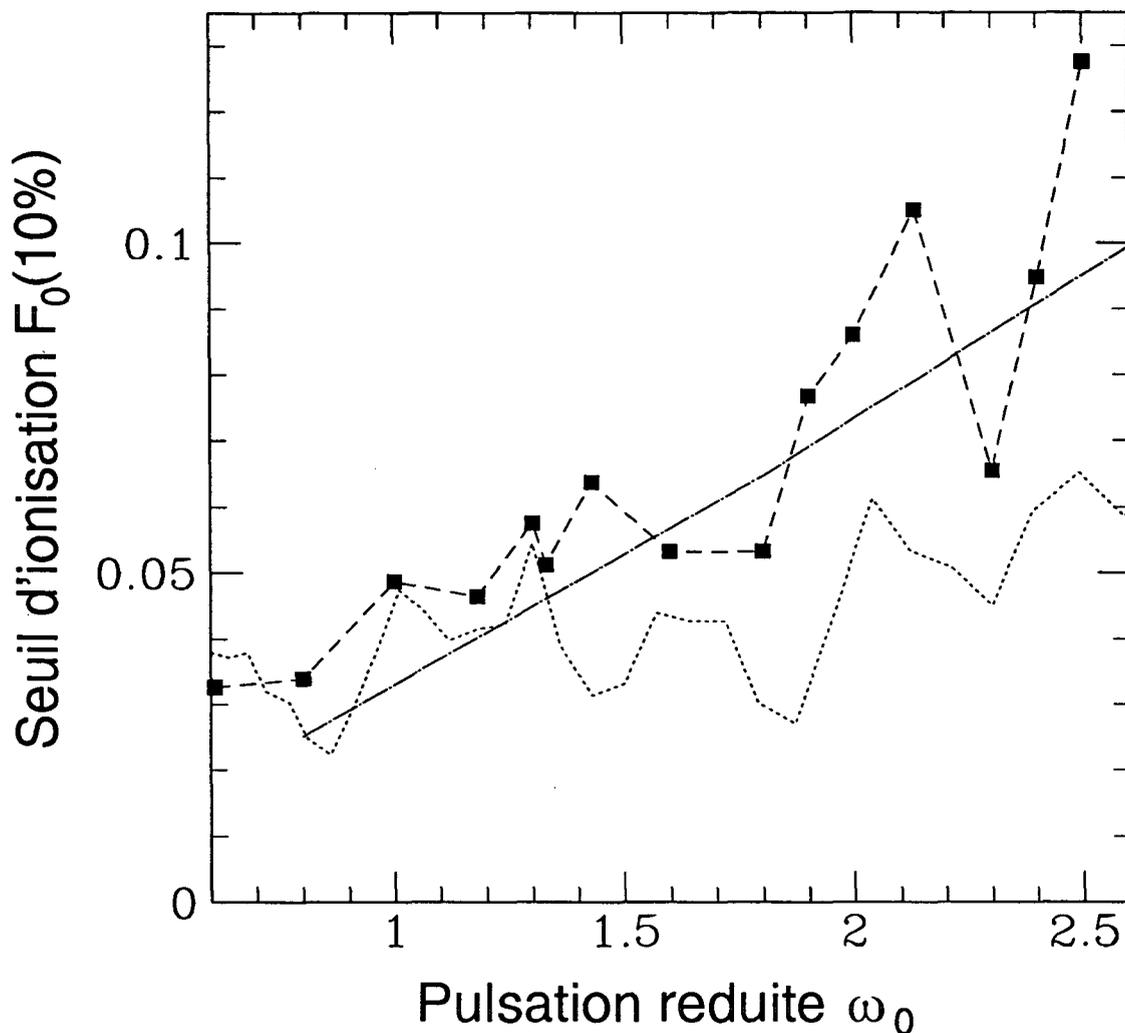


FIG. 5.3 - Seuil d'ionisation $F_0(10\%)$ de l'état $|n_0 = 23\rangle$, en fonction de la pulsation réduite ω_0 (carrés et trait discontinu). Temps d'interaction physique $t = 4.6 \times 10^{-10}$ sec, correspondant à $t_0/2\pi = 249$ passages de l'électron au périhélie. Trait pointillé: Résultats expérimentaux de Galvez et al. [28], obtenus pour $\omega/2\pi = 36.02$ GHz, $t \simeq 9.1 \times 10^{-9}$ s et $n_0 = 57, \dots, 78$. Trait discontinu pointillé: Seuil de délocalisation quantique d'après Casati et al. [16], (5.2), avec $n_0 = 62$ et un seuil de continuum effectif à $n_c = 90$.

tion *sans* ionisation au-delà de n_c et une dissociation directe de l'atome, induite par la micro-onde.

Un problème analogue se pose pour l'expérience numérique. Comme nous avons vu dans le chapitre 4.5, la taille finie de la base Sturmienne que nous utilisons pour la diagonalisation de l'Hamiltonien décrivant notre système impose une limitation de la résolution spectrale que nous pouvons obtenir, définissant ainsi un seuil de continuum effectif qui dépend essentiellement de la longueur et du paramètre d'échelle de la base Sturmienne (4.17).

Dans certaines limites assez étroites, il est possible d'ajuster le seuil effectif numérique à celui indiqué pour les expériences réelles. Pourtant, quand n_c est trop proche de n_0 , un tel ajustement est prohibé, car il impliquerait un raccourcissement de la base Sturmienne au-dessous des valeurs garantissant la convergence des résultats. Ceci est le cas pour les résultats expérimentaux montrés à la figure 5.3 qui ont été obtenus avec $n_c^{exp} \simeq 90$ ($n_0 \simeq 60$). Le continuum effectif de la simulation numérique ($n_0 = 23$) est situé auprès de $n_c^{sim} \simeq 62$ et on a donc un rapport de n_c à n_0 qui est plus grand dans la simulation que dans l'expérience. Néanmoins, nous nous sommes convaincus qu'un changement du seuil effectif n'a pas de conséquence considérable pour la localisation dynamique, ce qui permet de le négliger pour une comparaison qualitative entre les différentes courbes.

La prévision de Casati et al.[16] est dessinée en trait discontinu pointillé à la figure 5.3. On voit qu'il y a un accord assez bon entre le seuil prévu par la théorie de la localisation dynamique et la simulation numérique unidimensionnelle. Néanmoins, cela n'est vrai que pour la dépendance fonctionnelle de ω_0 et *pas* pour la valeur absolue du seuil. Le seuil "de délocalisation quantique" prédit par Casati et al. et à identifier avec $F_0(10\%)$ étant décrit par [16]

$$F_0(10\%) \simeq \left[\frac{\omega^{1/6}}{\sqrt{8}} \sqrt{1 - \frac{n_0^2}{n_c^2}} \right] \omega_0 \quad (5.2)$$

n'obéit *pas* à une loi d'échelle classique telle que (3.19). Si l'on néglige le terme quadratique en n_0 on trouve que

$$F_0(10\%) \sim \omega^{7/6} n_0^3, \quad (5.3)$$

où la dépendance explicite de n_0 ne peut pas être éliminée par une des identités (3.19).

Pour cette raison la courbe de la figure 5.3 a été obtenue pour une valeur typique de $n_0 = 62$ des expériences de Galvez et al.[28]. Le résultat prévu par (5.2) pour la valeur $n_0 = 23$ de la simulation numérique fournirait des valeurs absolues de $F_0(10\%)$ trop élevées d'un facteur deux environ.

Pourtant, comme l'intérêt principal de la théorie de la localisation dynamique est d'abord de prévoir la dépendance fonctionnelle de $F_0(10\%)$ en fonction de ω_0 , il nous semble justifié de souligner le succès surprenant de cette théorie fondée sur un modèle très simple de l'atome par la comparaison établie à la figure 5.3.

5.4 Analyse des résultats et première comparaison aux expériences

Nous venons maintenant à une comparaison détaillée de nos résultats unidimensionnels avec les expériences de Koch et al. [28, 135].

Partant des résultats présentés à la figure 5.3, nous allons d'abord étudier la dépendance globale du seuil d'ionisation avec la pulsation. Nous allons ensuite présenter une autre simulation plus proche des conditions expérimentales, ce qui nous conduira à une première discussion de l'hypothèse des cicatrices [36, 42] pour expliquer les résultats expérimentaux de ces auteurs.

5.4.1 Dépendance globale du seuil avec la pulsation réduite

Si l'on postule la pertinence des lois d'échelle classiques (3.19) et du modèle unidimensionnel, *deux hypothèses fondamentales qui restent à vérifier* (cf. 5.7.2, 6.2.4), on attend la reproductibilité des résultats expérimentaux de Koch et al. [28, 135] dans une expérience numérique comme la nôtre, même pour $n_0 = 23$.

La figure 5.3 montre que cette reproductibilité ne s'exprime que par un accord qualitatif, à l'exception d'une coïncidence acceptable des deux résultats dans l'intervalle $\omega_0 \in [0.6; 1.33]$. La comparaison avec un autre résultat [135] du même groupe qui est montré à la figure 5.4 se présente un peu plus favorablement, dans l'intervalle $\omega_0 \in [1.6; 1.8]$. Pourtant, elle est due au fait que certaines structures observées par Koch et al. ne sont pas entièrement reproductibles (Les résultats expérimentaux de la figure 5.4 ont été obtenus avec la même configuration expérimentale sauf une valeur de n_c^{exp} augmentée à 118.).

Le désaccord principal entre la simulation numérique 1D pour $n_0 = 23$ et l'expérience se produit donc pour des valeurs de $\omega_0 \in [1.33; 1.6]$ et $\omega_0 \in [2.0; 2.5]$.

Quelles sont les sources possibles pour cet écart entre simulation et expérience? Nous en avons déjà mentionné quelques-unes au cours de ce mémoire et nous résumons brièvement:

- La différence en n_0 et une désobéissance de la mécanique quantique aux lois d'échelle classiques (3.19);
- le changement de ω_0 non pas par un changement de n_0 , mais plutôt de la pulsation ω ;
- le fait de négliger l'enveloppe de l'amplitude de la micro-onde dans l'approche numérique et donc d'éventuelles transitions dynamiques entre différents états de Floquet pendant la phase de montée de l'amplitude;
- la définition imprécise de l'état initial peuplé dans les expériences de laboratoire, ou, même dans le cas d'un état de départ bien défini, sa nature tridimensionnelle et alors l'inadaptation d'un modèle unidimensionnel pour la compréhension des structures locales de $F_0(10\%)$ en fonction de ω_0 .

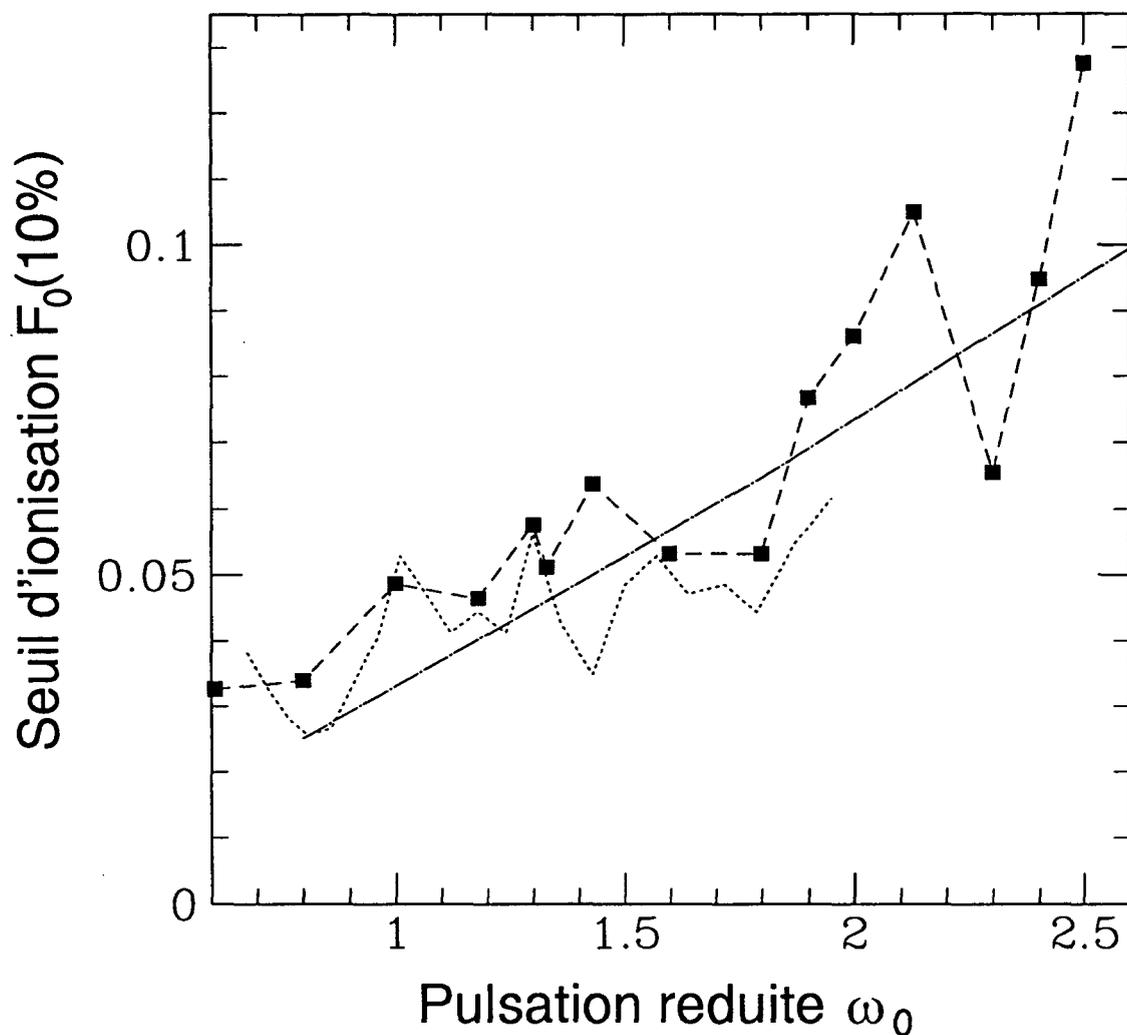


FIG. 5.4 - Simulation numérique et seuil de délocalisation quantique comme sur la figure 5.3. Trait pointillé: Résultat expérimental du groupe de Stony Brook, avec un seuil de continuum effectif $n_c^{exp} \simeq 118$, au lieu de $n_c^{exp} \simeq 90$ sur la figure 5.3. On voit que les structures locales sont en gros bien reproduites dans les deux cas, à l'exception du minimum local au voisinage de $\omega_0 \simeq 1.85$ qui est beaucoup plus prononcé pour $n_c^{exp} \simeq 90$ que pour $n_c^{exp} \simeq 118$.

Notre but pendant la suite de ce chapitre sera d'analyser ces différentes possibilités.

Pour commencer avec la première, nous poursuivons notre comparaison initiée avec les figures 5.3 et 5.4 en y ajoutant la simulation de l'ionisation de l'atome *unidimensionnel* pour *exactement* les paramètres des expériences réelles. La figure 5.5 montre le résultat des calculs pour des états de départ de $|n_0 = 57\rangle$ à $|n_0 = 77\rangle$, dans un champ micro-onde de fréquence $\omega/2\pi = 36.02$ GHz, et pour un temps physique d'interaction $t = 9.1 \times 10^{-9}$ s. Cela correspond à des valeurs de $t_0 \simeq 2030 \dots 824$, c'est-à-dire du nombre de passages de l'électron au périhélie de ca. 323 à ca. 131. Le seuil effectif de continuum dans cette nouvelle simulation est égal à $n_c^{sim} \simeq 133$, donc très proche des résultats plus récents de Koch et al. [10, 135]. Pour cette raison, nous répétons les mêmes résultats sur la figure 5.6, qui fournit la comparaison avec les expériences d'un $n_c^{exp} \simeq 118$.

Les deux figures nous mènent aux remarques suivantes:

- L'accord entre la simulation et le résultat expérimental est *très bon*, en moyenne des valeurs absolues du seuil.
- Le seuil "numérique" pour $n_0 \simeq 60$ montre un comportement beaucoup plus mou en fonction de ω_0 que aussi bien la simulation pour $n_0 = 23$ que le seuil expérimental. A part une *décroissance* abrupte de $F_0(10\%)$ à $\omega_0 = 1.3$, il ne subsiste plus de structures locales.
- Contrairement aux simulations pour $n_0 = 23$, le désaccord principal entre simulation et expérience se produit maintenant à $\omega_0 \simeq 1.3$. C'est d'ailleurs exactement à l'endroit du maximum local le plus discuté de l'expérience de Koch et al. [10], connu comme la "stabilité anormale" [42] de ces expériences et attribué à une cicatrice de la fonction d'onde électronique [42, 10]. Nous reviendrons sur ce point à maintes occasions pendant la suite de ce travail (cf. 5.5, 5.7.2, 6.2.4).
- La figure 5.6 semble indiquer une deuxième stabilité anormale de l'expérience par rapport à la simulation, près de $\omega_0 = 1.6$.

La première observation suggère que, en fait, la mécanique quantique n'obéit aux lois d'échelles classiques (3.19) que de manière approchée. Cela semble bien naturel, comme l'augmentation de n_0 implique la croissance du nombre de photons N_0 nécessaire pour arriver au continuum, d'après (4.1). Ainsi on se rapproche de la limite semiclassique et la courbe *entière* est décalée vers des valeurs de $F_0(10\%)$ plus basses, bien qu'elle maintienne son allure montante en fonction de la pulsation réduite.

On s'aperçoit aussi du fait que le seuil effectif du continuum ne peut jouer qu'un rôle d'ordre secondaire pour la dépendance du seuil d'ionisation en fonction de la pulsation. On voit bien à la figure 5.5 que l'accord entre expérience et simulation numérique s'améliore pour les grandes valeurs de la pulsation, bien que l'équation (5.2) prévoit un impact de plus en plus important de n_c sur $F_0(10\%)$ pour des valeurs croissantes de n_0 .

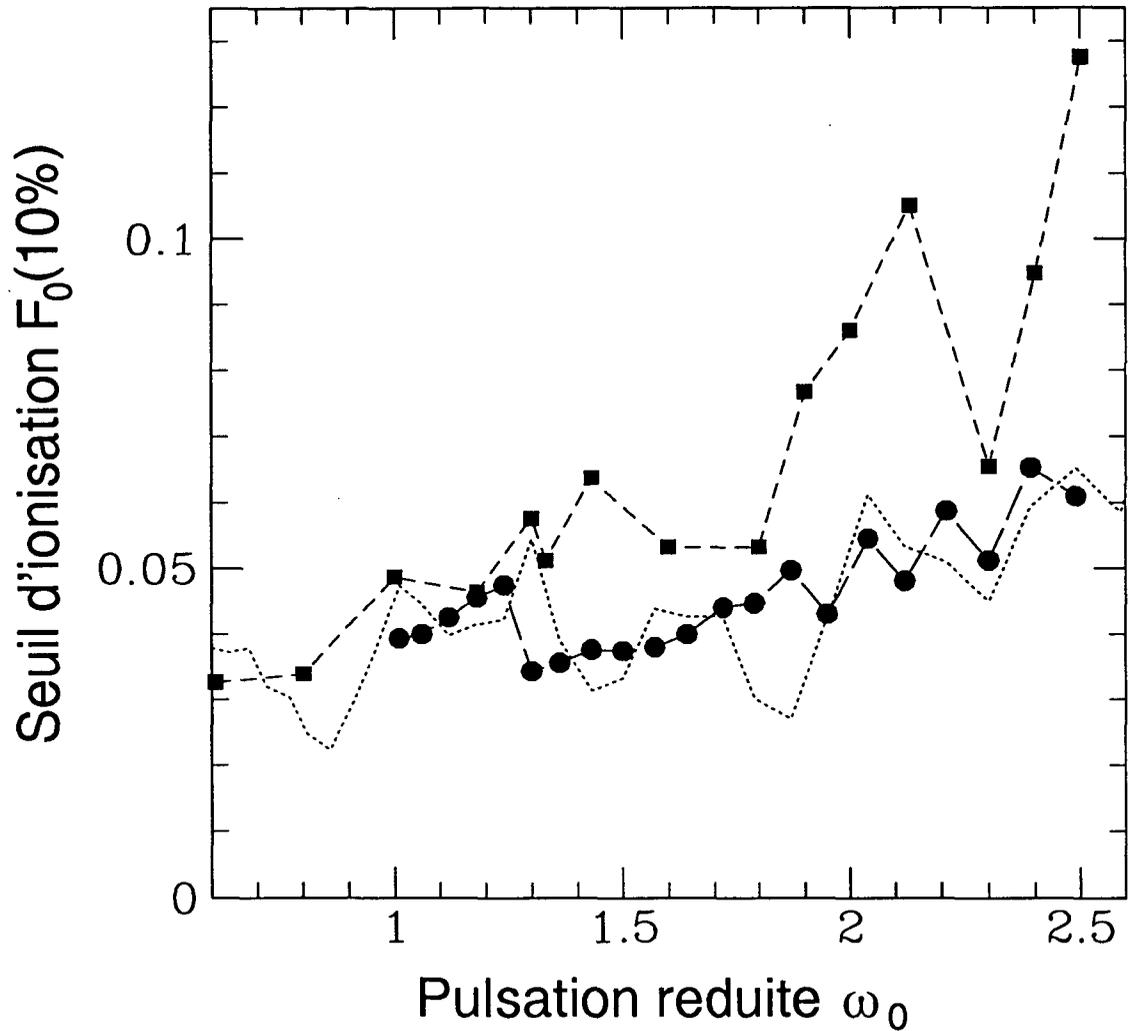


FIG. 5.5 - Simulation de l'ionisation d'un atome unidimensionnel dans les conditions des expériences du groupe de Stony Brook [28], c'est-à-dire: $n_0 = 57 \dots 77$, $\omega/2\pi = 36.02$ GHz, $t \simeq 9.1 \times 10^{-9}$ s, $t_0 \simeq 2030 \dots 824$. Les autres courbes comme sur la figure 5.3.

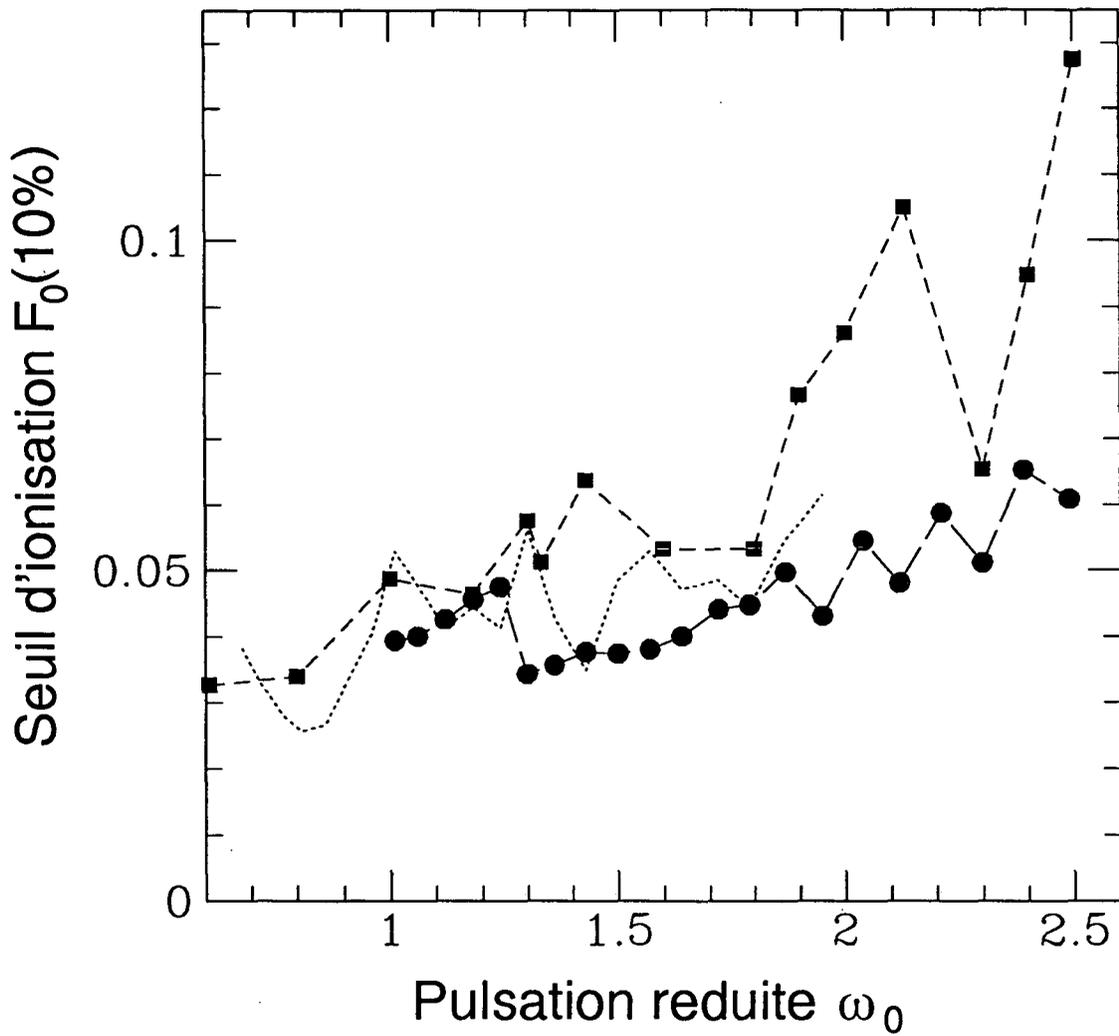


FIG. 5.6 - Mêmes résultats numériques que à la figure 5.5 ($n_c^{sim} \simeq 133$), en comparaison avec les expériences du groupe de Stony Brook, obtenus au seuil effectif de continuum $n_c^{exp} \simeq 118$ [135].

La même remarque s'applique à la comparaison du résultat numérique avec l'expérience effectuée par J. Bayfield et al.[8] à Pittsburgh, qui est visualisée sur la figure 5.7.

Ces résultats ont été obtenus sous des conditions différentes de ceux de Koch et al.: le nombre quantique principal *ainsi* que la fréquence ω ont été changés pour couvrir tout l'intervalle de ω_0 . De plus, le temps d'interaction a été raccourci par rapport aux expériences de Stony Brook d'un facteur environ 3, suite aux contraintes imposées par une géométrie expérimentale différente. Enfin, les expériences de Pittsburgh ont l'avantage de partir d'un état initial bien défini, à savoir un état parabolique extrémal $|n_1 = n - 1, n_2 = 0, m = 0\rangle$, bien localisé le long du champ électrique de la micro-onde.

Bien qu'il y ait une différence considérable entre les paramètres de départ, les résultats de Bayfield et al. et Koch et al. montrent un comportement global bien similaire, probablement à cause de la taille effective de \hbar (ou du nombre N_0) en gros comparable dans les deux expériences. Notamment pour les valeurs de $\omega_0 \geq 2.0$, les deux courbes sont très bien reproduites par l'expérience numérique.

L'accord entre expérience et simulation notamment pour les grandes valeurs de ω_0 , implique de plus que les différentes manières de balayer ω_0 appliquées dans l'expérience et dans la simulation avec $n_0 = 23$ ne peuvent pas être responsables du désaccord entre les résultats correspondants. Comme l'échange d'énergie entre l'atome et le champ se produit préférentiellement près du noyau, c'est-à-dire pendant le passage de l'électron au périhélie, on devrait s'attendre à un seuil d'ionisation plus important dans le cas où il y a *moins* de tels passages pendant l'interaction avec la perturbation extérieure. Ceci étant justement le contraire de ce qu'on observe, on peut rejeter ce point parmi les possibles explications pour le désaccord observé, d'autant plus que la simulation avec les paramètres expérimentaux fournit des résultats très satisfaisants. Par conséquent, l'effet introduit par un temps d'interaction physique fixe en lieu de la constance du temps réduit peut être considéré d'ordre secondaire (voir aussi notre étude de la dépendance temporelle de $F_0(10\%)$ dans le paragraphe 5.6).

5.4.2 Structures locales de $F_0(10\%)$ en fonction de ω_0

En résumant la comparaison des simulations numériques 1D pour $n_0 = 23$ et $n_0 \simeq 60$ aux résultats expérimentaux de Koch et al.[28, 135], nous voyons qu'une coïncidence acceptable, pour les *deux* valeurs de n_0 , ne se produit que dans l'intervalle $\omega_0 \in [0.6; 1.33]$. Notons déjà ici que c'est juste au voisinage de la résonance principale entre la perturbation externe et la fréquence atomique, donc dans la région du couplage le plus fort entre champ et atome (cf. 5.7.2, 6.2.3, 6.2.4).

Si l'on exclut pour l'instant l'effet de l'enveloppe expérimentale de l'impulsion de micro-onde, ce que nous justifierons dans la suite (cf. 5.5), les structures locales de $F_0(10\%)$ observées dans l'expérience de Koch et al. ne peuvent être attribuées qu'au caractère tridimensionnel de l'état initial.

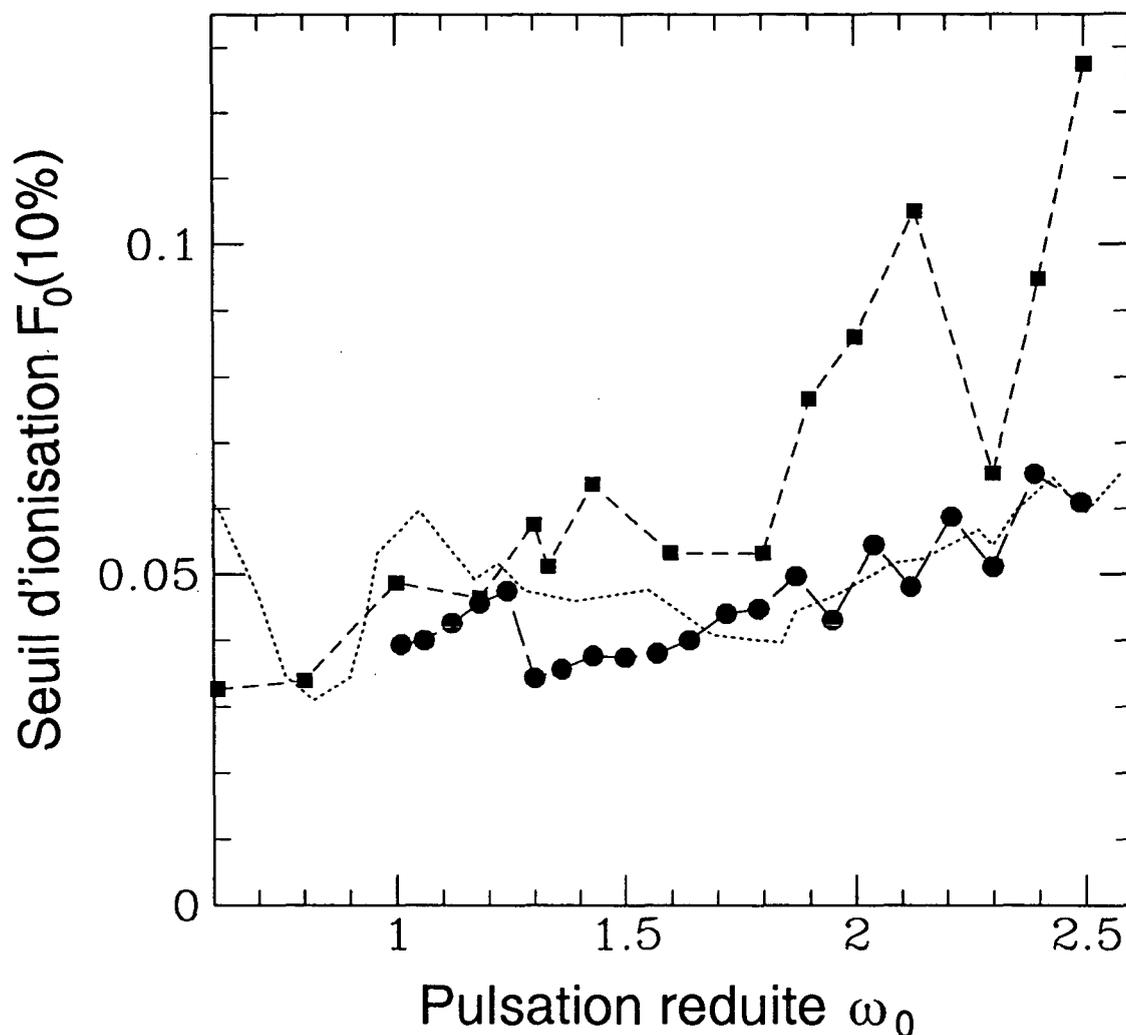


FIG. 5.7 - Mêmes résultats numériques qu'aux figures 5.5 et 5.6, en comparaison avec les résultats expérimentaux de Bayfield et al. [8]. Ces derniers ont été obtenus pour différentes valeurs de n_0 et de ω_0 , en partant d'un état parabolique extrême $|n_1 = n - 1, n_2 = 0, m = 0\rangle$. Le temps d'interaction était plus court d'un facteur d'environ 3 que dans l'expérience de Koch et al. et dans notre simulation. L'enveloppe de l'impulsion de micro-onde avait le profil d'un demi-cycle sinusoïdal dans cette expérience.

Cet argument est encore renforcé par la comparaison avec les données publiées par Bayfield et al. (voir la figure 5.7), qui sont obtenues à partir d'un état parabolique extrémal dont la probabilité électronique est essentiellement concentrée le long d'une dimension spatiale (cf. 4.2, 6.2.4): sur exactement la même échelle verticale, il n'y a pratiquement pas de structures locales pour $\omega_0 \geq 1.6$, en opposition avec les résultats du groupe de Stony Brook. Nous verrons (cf. 5.6) que la différence du temps d'interaction entre les deux configurations expérimentales n'empêche pas cette comparaison.

La chute abrupte du résultat numérique juste à l'endroit de la "stabilité anormale" de l'expérience de Stony Brook et au milieu du côté légèrement descendant du seuil obtenu à Pittsburgh est très probablement due à la largeur effective de la résonance principale dans l'espace des phases classique (cf. 1.1.2, 3.3), pour les mêmes paramètres physiques.

Cette région elliptique de l'espace des phases sert comme "piège" (cf. 5.7.2) de la probabilité classique ainsi que quantique et peut se manifester sur un intervalle de ω_0 dont les limites exactes dépendront de la nature précise de l'état initial (tridimensionnel), de la taille effective de \hbar , du temps d'interaction et de l'enveloppe de l'impulsion du champ externe.

Dans cette région on s'attend donc à un maximum local du seuil d'ionisation, s'étendant autour de la fréquence réduite $\omega_0 = 1.0$ jusqu'à une valeur de ω_0 correspondant à l'extension de la résonance dans l'espace des phases.

Il est plausible que dans le système quantique réel la taille effective de cette région stable du mouvement classique dépende des détails expérimentaux et que la sortie de cette région puisse se manifester de manière plus ou moins abrupte en fonction de ω_0 . Le plus abrupte probablement dans le cas d'une projection adiabatique de la fonction d'onde sur les états propres du problème, ce qui est fait dans notre approche numérique (cf. 4.1).

5.4.3 Conclusion

En somme, nous avons vu dans les deux paragraphes précédents que le modèle unidimensionnel de l'atome d'hydrogène permet une description raisonnable de la dépendance de $F_0(10\%)$ avec ω_0 , même *sans* la prise en compte de l'enveloppe de l'impulsion du champ de micro-onde.

L'effet de "localisation dynamique" est reproduit pour des valeurs de n_0 et donc de la taille effective de \hbar très différentes, bien que le changement de ce dernier paramètre montre un effet net sur la valeur absolue du seuil d'ionisation, en accord avec une image semiclassique. L'origine des structures locales notamment observées par Koch et al.[10, 28, 135] reste à éclaircir, ainsi que leur pertinence pour l'interprétation du processus d'ionisation en terme de chaos quantique [36, 42, 51, 56, 57]. Bien que nous favorisions en fait une explication fondée sur la tridimensionalité des états initiaux dans les différentes expériences (cf. 6.2.4), nous allons d'abord illustrer les différentes sources possibles pour l'apparition d'extrema locaux de $F_0(10\%)$ dans le modèle unidimensionnel. Il faut

pourtant ne pas oublier pendant cette partie de notre exposé que les détails rencontrés dans l'étude de ce modèle ne doivent reproduire le système réel que de manière qualitative. Plus une propriété est "locale", plus elle risque de perdre son importance réelle dans le système avec un nombre de degrés de liberté accru. Les deux paragraphes suivants serviront ainsi plutôt à démontrer la richesse des aspects quantiques différents d'un système "réaliste" non-autonome et classiquement irrégulier, qu'à la recherche d'une interprétation quantitative détaillée des expériences actuelles.

5.5 Niveaux d'énergie et seuil d'ionisation

Dans cette section, nous allons mettre en évidence le lien étroit entre la dynamique des valeurs propres et des largeurs de notre Hamiltonien (4.42) d'un côté, et de la probabilité d'ionisation obtenu par (4.61), de l'autre côté.

Nous allons d'abord relever l'existence de structures non monotones dans le signal d'ionisation, qui mettent en cause l'unicité de la définition de $F_0(10\%)$. Ensuite, nous montrerons l'immense sensibilité de ces structures vis-à-vis des changements de la valeur de la pulsation ω et leur évolution quasi-continue en fonction de n_0 . Enfin, nous en discuterons les conséquences pour l'interprétation des structures locales de $F_0(10\%)$ observées par Koch et al. [10].

5.5.1 Non-monotonies du signal d'ionisation

Nous allons d'abord revoir la définition du seuil d'ionisation introduite dans le paragraphe 5.2 et notamment à la figure 5.2.

Sur cette figure, la probabilité d'ionisation montre un comportement monotone en fonction de l'amplitude du champ et la définition de $F_0(10\%)$ est donc univoque. Pourtant, ceci n'est pas le cas générique, comme nous le montrerons: on observe, en corrélation étroite avec la dynamique notamment des parties *imaginaires* des niveaux de quasiénergie, des structures *non-monotones* ("subthreshold-peaks") dans le signal d'ionisation.

Leur présence, déjà démontrée dans le régime $\omega_0 \leq 1.0$ par Blümel et Smilansky [33] et prédit par Breuer, Dietz et Holthaus pour le régime $\omega_0 > 1.0$ [136], est ici directement corrélé, pour la première fois, avec les trajectoires des valeurs propres complexes de l'Hamiltonien tourné (4.42) dans le plan complexe et donc avec la dynamique des positions et des *largeurs* des resonances en fonction de l'amplitude du champ.

La figure 5.8 montre deux exemples de telles structures non-monotones de P_{ion} , pour l'état initial $|n_0 = 23\rangle$ de l'atome unidimensionnel.

La partie (a) représente le signal d'ionisation pour une fréquence réduite $\omega_0 = 1.0$. Le temps d'interaction est identique à celui choisi à la figure 5.2, $t = 4.6 \times 10^{-10}$ s. On observe des maxima locaux de P_{ion} à des valeurs du champ $F_0 \simeq 0.032$, $F_0 \simeq 0.041$ et $F_0 \simeq 0.047$. A cette dernière valeur, la probabilité d'ionisation prend une valeur au-delà de 10%, avant de retomber sur un petit intervalle de F_0

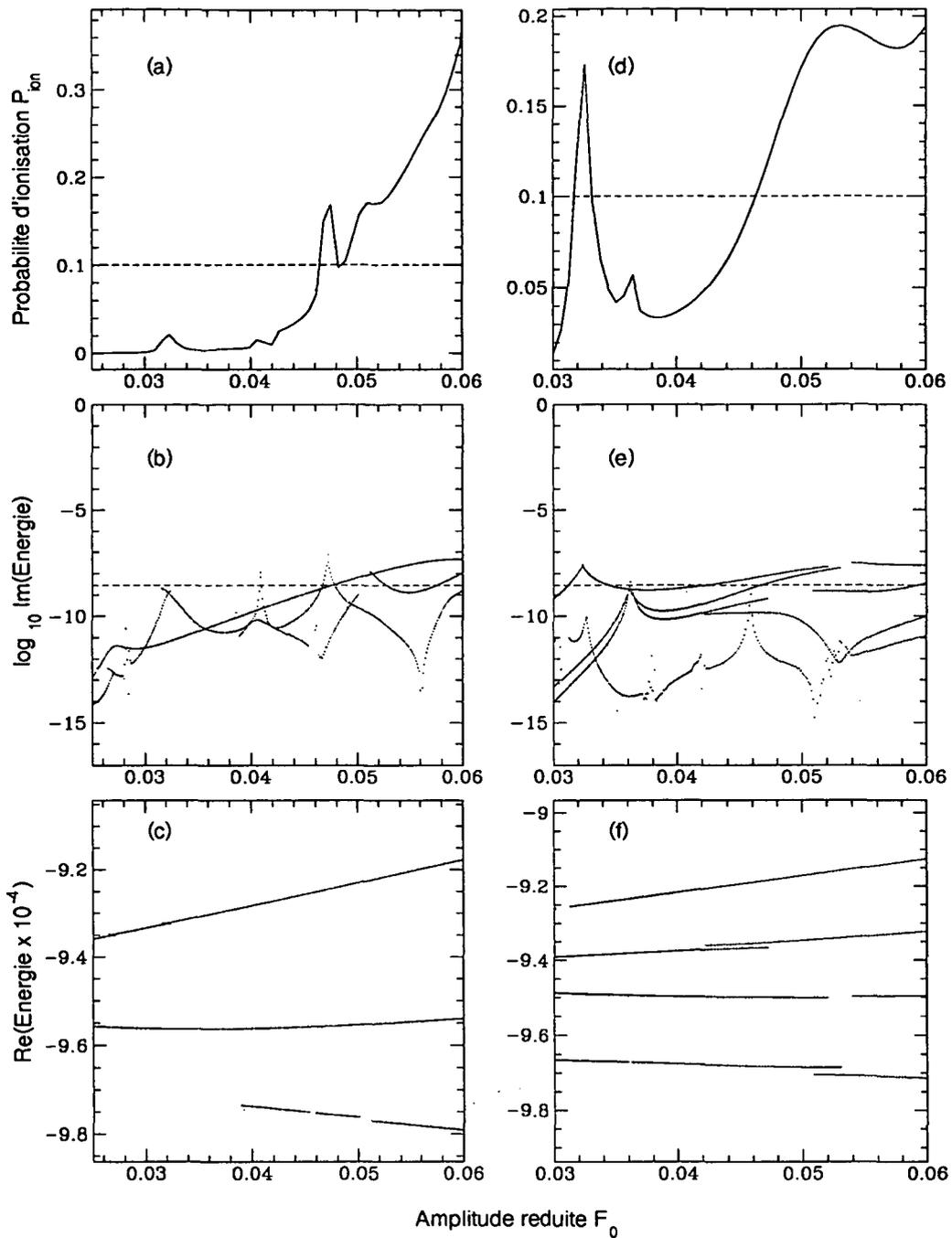


FIG. 5.8 - Comportement "typique" de la probabilité d'ionisation en fonction de l'amplitude du champ micro-onde; à comparer à la figure 5.2. État initial pour (a)-(f): $|n_0 = 23\rangle$. (a) Probabilité d'ionisation de $|n_0\rangle$ en fonction de F_0 , à $\omega_0 = 1.0$ et $t = 4.6 \times 10^{-10}$ s. (b) Dépendance de la largeur (en unités atomiques) des niveaux de Floquet (ayant un recouvrement plus grand que 10% avec l'état initial) en fonction de F_0 , sur la même échelle et sous les mêmes conditions qu'en (a). (c) Parties réelles des niveaux de Floquet, en fonction de F_0 . Les niveaux montrés correspondent aux largeurs dans (b). (d)-(f) Autre exemple analogue à (a)-(c), avec $\omega_0 = 1.18$. La ligne interrompue en (a) et (d) marque le taux de 10%, celle en (b) et (e) la valeur correspondante de la largeur. Pour les détails voir le texte.

au voisinage de 10%, le taux de 10% étant indiqué par la ligne interrompue. Si l'on suppose une précision relative de la mesure expérimentale de l'amplitude F_0 meilleure que 5% [10], ce qui correspond à $\Delta F_0 < 2.5 \times 10^{-3}$ à la position de ce maximum local, il se trouve à la limite de la résolution expérimentale.

La partie (b) de la figure montre la dépendance de la largeur des niveaux de quasiénergie sur une échelle *logarithmique*, en fonction de F_0 et sur le même intervalle d'amplitude que (a), dans exactement les mêmes conditions physiques.

Seuls les états de Floquet ayant un recouvrement avec l'état initial supérieur à 10% - et contribuant donc notablement à la dynamique du système - sont représentés. Ceci explique que quelques courbes soient interrompues, à certaines valeurs de F_0 , quand le recouvrement devient inférieur à 10%. De manière générale, on trouve quelques centaines de valeurs propres dans une seule zone de Floquet, dont la plupart ont un recouvrement négligeable avec l'état initial et ne contribue donc pas à la dynamique. Typiquement, il n'y a qu'une dizaine de valeurs propres avec un recouvrement plus grand que 1% avec l'état initial [133].

La ligne interrompue représente la valeur correspondant à un état de Floquet qui décroît de 10% par ionisation pendant le temps d'interaction avec le champ. L'attribution des différentes "pointes" formées par des parties imaginaires correspondant à des quasiénergies qui s'anticroisent au point où le signal d'ionisation n'est pas monotone est immédiate, ainsi que celle de la lente croissance globale des parties imaginaires à la montée de la probabilité d'ionisation. Une "pointe" qui se produit au voisinage de la ligne indiquant le taux d'ionisation de 10% résulte dans un maximum local de la probabilité d'ionisation sur la figure (a). L'amplitude relative de ces maxima dépend des poids relatifs des états de Floquet correspondants dans la somme de la formule (4.61).

Dans la partie (c), on voit les parties réelles des valeurs propres des résonances qui correspondent aux parties imaginaires dessinées en (b). Seuls les anticroisements à $F_0 \simeq 0.028$ et à $F_0 \simeq 0.032$ sont résolus sur l'échelle d'une zone de Floquet représentée en (c). Les anticroisements à $F_0 \simeq 0.041$ et $F_0 \simeq 0.047$ sont trop étroits pour se manifester dans la dynamique des parties réelles et ne peuvent donc être relevés que par l'étude de la dynamique des largeurs. A leurs positions, on observe une quasidégénérescence des niveaux (anti-)croisants, ce qui permet la définition de niveaux de quasiénergie "effectifs" [137] qui sont en fait composés par des branches des différents niveaux qui s'anticroisent. Dans le cas représenté ici, *tous* les anticroisements visibles en (b) se produisent sur le niveau d'énergie le plus élevée en (c), bien qu'il n'y en ait que deux qui soient résolus sur les parties réelles. La taille négligeable des anticroisements aux positions des quasidégénérescences correspond d'ailleurs bien à la pente très raide des parties imaginaires correspondantes à leur voisinage. Notons que sur la figure (b), les largeurs ont été portées sur une échelle *logarithmique*!

Sur la figure (d), nous montrons le signal d'ionisation du même état initial, mais à une fréquence $\omega_0 = 1.18$ de la perturbation. On observe un très joli maximum local de la probabilité d'ionisation près de $F_0 \simeq 0.032$ qui correspond à un anticroisement isolé et bien prononcé sur la figure (e). De même pour deux anticroisements avec des parties imaginaires quasi coïncidentes à $F_0 \simeq 0.036$,

qui se manifestent par un petit maximum de $P_{ion} \simeq 0.055$. De nouveau, les anticroisements des parties réelles sont trop petits pour être résolus sur la figure (f).

A part les anticroisements isolés qui provoquent des maxima de P_{ion} bien pointus, nous observons ici encore un autre phénomène: le passage *simultané* de plusieurs largeurs à la valeur critique qui correspond à un taux d'ionisation de 10% pendant le temps d'interaction expérimental. Cela se produit à la figure (e) dans l'intervalle $F_0 \simeq 0.042 \dots 0.058$ et induit une structure beaucoup plus molle dans le signal d'ionisation en (d). A notre connaissance, il n'y a que de telles structures molles de largeur supérieure à 0.005 sur l'échelle du champ réduit qui ont été observées dans les expériences de Koch et al.[10] et que nous désignerons comme "épaulements" ("shoulders") dans le signal d'ionisation. On en a surtout trouvé dans des expériences utilisant un champ micro-onde bichromatique [41, 138, 139] et pour des fréquences réduites $\omega_0 \leq 1.0$ [24].

A partir de la figure 5.8 (a) et (d), il est évident que la définition du seuil d'ionisation n'est pas nécessairement univoque. Dépendant de la résolution expérimentale et de l'enveloppe de l'impulsion de micro-onde (qui induit différentes populations initiales des états de Floquet), ainsi que du choix du taux X définissant le seuil d'ionisation, on peut obtenir, d'après les résultats de ce modèle *unidimensionnel*, des valeurs de $F_0(X\%)$ nettement différentes pour *le même état initial et la même fréquence réduite!*

Pourtant, il existe des valeurs de ω_0 où l'on observe un comportement de P_{ion} quasi-monotone, comme on l'avait déjà vu à la figure 5.2, que nous reprenons dans la figure 5.9 (d), avec la dynamique des niveaux correspondants et les courbes analogues pour une valeur voisine de la pulsation.

Ainsi, il devient bien compréhensible déjà à partir du modèle unidimensionnel que différentes expériences peuvent aboutir à des structures locales différentes pour la dépendance de $F_0(10\%)$ en fonction de la pulsation réduite ω_0 . Nous allons voir de plus que l'apparition d'extréma du signal d'ionisation dépend de la taille effective de \hbar , c'est-à-dire du nombre quantique principal de l'état initial. Il reste donc la question de la pertinence de telles structures pour la compréhension du processus d'ionisation et de la méthode d'analyse pour les prendre en compte. Le fait de partir d'un état initial vraiment tridimensionnel, avec une densité d'états et donc d'anticroisements encore accrue, rend cette analyse de toute évidence plus compliquée.

5.5.2 Les structures non-monotones et leur dépendance avec la pulsation

Sur la figure 5.9, nous apercevons, dans les deux cas représentés, un seul anticroisement conduisant à un faible maximum local de P_{ion} à $F_0 \simeq 0.042$ (figs. (a) et (b)) et à $F_0 \simeq 0.045$ (figs. (d) et (e)), de nouveau accompagné par des quaside-générescences des parties réelles associées. La pulsation réduite ayant une valeur de $\omega_0 = 1.304$ (figs. (a)-(c)) et de $\omega_0 = 1.33$ (figs. (d)-(e)) ce sont les signaux

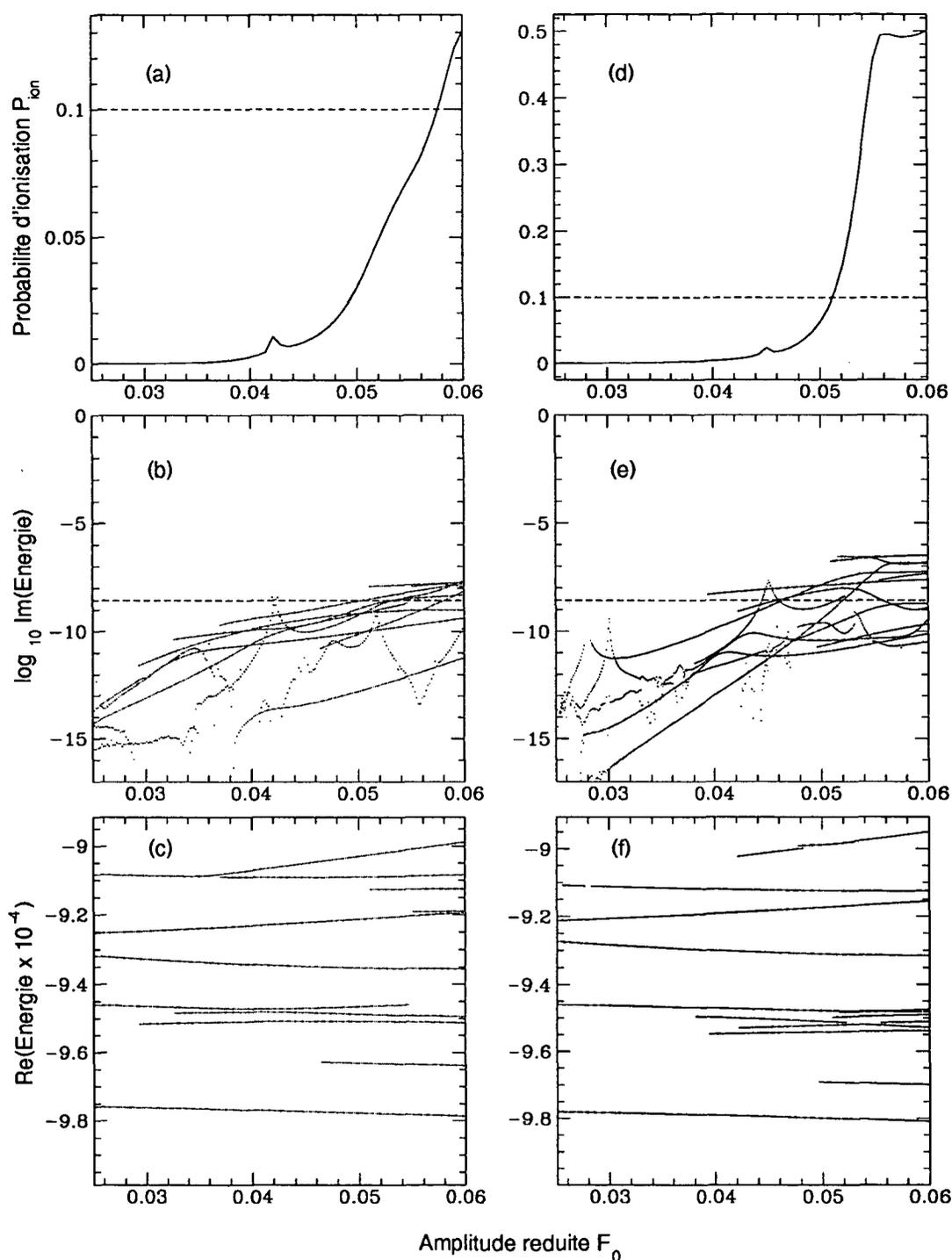


FIG. 5.9 - Probabilité d'ionisation de $|n_0 = 23\rangle$ à (a) $\omega_0 = 1.304$ et à (d) $\omega_0 = 1.33$, en fonction de l'amplitude réduite F_0 du champ micro-onde. Dynamique des parties imaginaires ((b) respectivement (e)) et réelles ((c) respectivement (f)) de l'énergie des états de Floquet ayant un recouvrement $\geq 1\%$ avec l'état initial. Les lignes interrompues marquent le taux de et la largeur correspondant à une ionisation de 10%.

d'ionisation obtenus pour $n_0 = 23$ au voisinage de la "stabilité anormale" de Koch et al.[10] (cf. 5.4.1 et 5.4.2).

A part un comportement globalement similaire des largeurs (qui ont ici été portées pour des recouvrements des états de Floquet avec l'état initial plus grand que 1%) et des parties réelles, on pourrait être tenté d'identifier les anticroisements près de $F_0 \simeq 0.042$ dans (b) avec celui près de $F_0 \simeq 0.045$ dans (e), suite aux valeurs de pulsation très proches dans les deux cas, en supposant une évolution lente et continue de la dynamique de niveaux avec la pulsation de la perturbation.

Pourtant, cette dernière hypothèse est *fausse*, comme on le voit dans la suite des graphes montrés à la figure 5.10. Chacune de ces images représente la dynamique des largeurs en fonction de F_0 , pour le même état initial $|n_0 = 23\rangle$, à des valeurs de la pulsation commençant à $\omega_0 = 1.300$ (fig. 5.10(a)) et puis croissant par des pas de 1×10^{-3} jusqu'à $\omega_0 = 1.310$ (fig. 5.10(k)). La figure 5.9 (b) est la même que la figure 5.10(e) et on voit donc très bien que la position des anticroisements montre une dépendance *très sensible* vis-à-vis des changements de la pulsation réduite. Seulement sur l'échelle de 1×10^{-3} une continuité de l'évolution peut être constatée, tandis que les positions ont complètement changé après un changement de ω_0 de 1×10^{-2} . Ainsi l'apparition des anticroisements pour $\omega_0 = 1.304$ et pour $\omega_0 = 1.33$ à peu près à la même valeur de F_0 sur les figures 5.9 (b) et (e) doit être considéré comme une coïncidence et, pour un futur travail, il semble plus raisonnable aborder le problème par une analyse statistique [19] de la distribution des largeurs en fonction de F_0 et de ω_0 . L'extrême sensibilité des positions des anticroisement est d'ailleurs une signature flagrante de la dynamique classique irrégulière sous-jacente à la dynamique quantique que nous étudions ici [19, 146].

Dans ce contexte, il faut aussi noter un autre aspect de cette sensibilité des anticroisements vis-à-vis d'un changement de pulsation et d'amplitude: de toute évidence, l'apparition d'un anticroisement accompagné par une croissance subite d'une des largeurs des niveaux impliqués comme nous l'avons vue ci-dessus, est accompagnée par une probabilité d'ionisation accrue sur un petit intervalle de F_0 . Vu la "vitesse" par rapport à un changement de ω_0 (à n_0 fixe) des pointes correspondantes formées par les largeurs associées, on peut s'attendre à des fluctuations importantes de la probabilité d'ionisation en fonction de la pulsation de la perturbation. Ceci sous la condition qu'on se limite à un intervalle de l'amplitude du champ qui n'engendre pas encore une probabilité d'ionisation globale notable.

Cette situation décrit assez précisément les conditions exigées pour l'observation des fluctuations de "conductivité" erratiques (cf. 1.1) prédites par Casati et al.[16, 17, 18] pour l'excitation de l'atome d'hydrogène par un champ micro-onde et fondées sur une analogie formelle entre le transport de probabilité dans un atome de Rydberg quasi-unidimensionnel dans un champ micro-onde et celui de charges dans un potentiel unidimensionnel périodique perturbé.

En supposant que l'approche 1D soit pertinente, nos résultats soulignent la condition d'un niveau d'ionisation global bas, donc la prédominance de la loca-

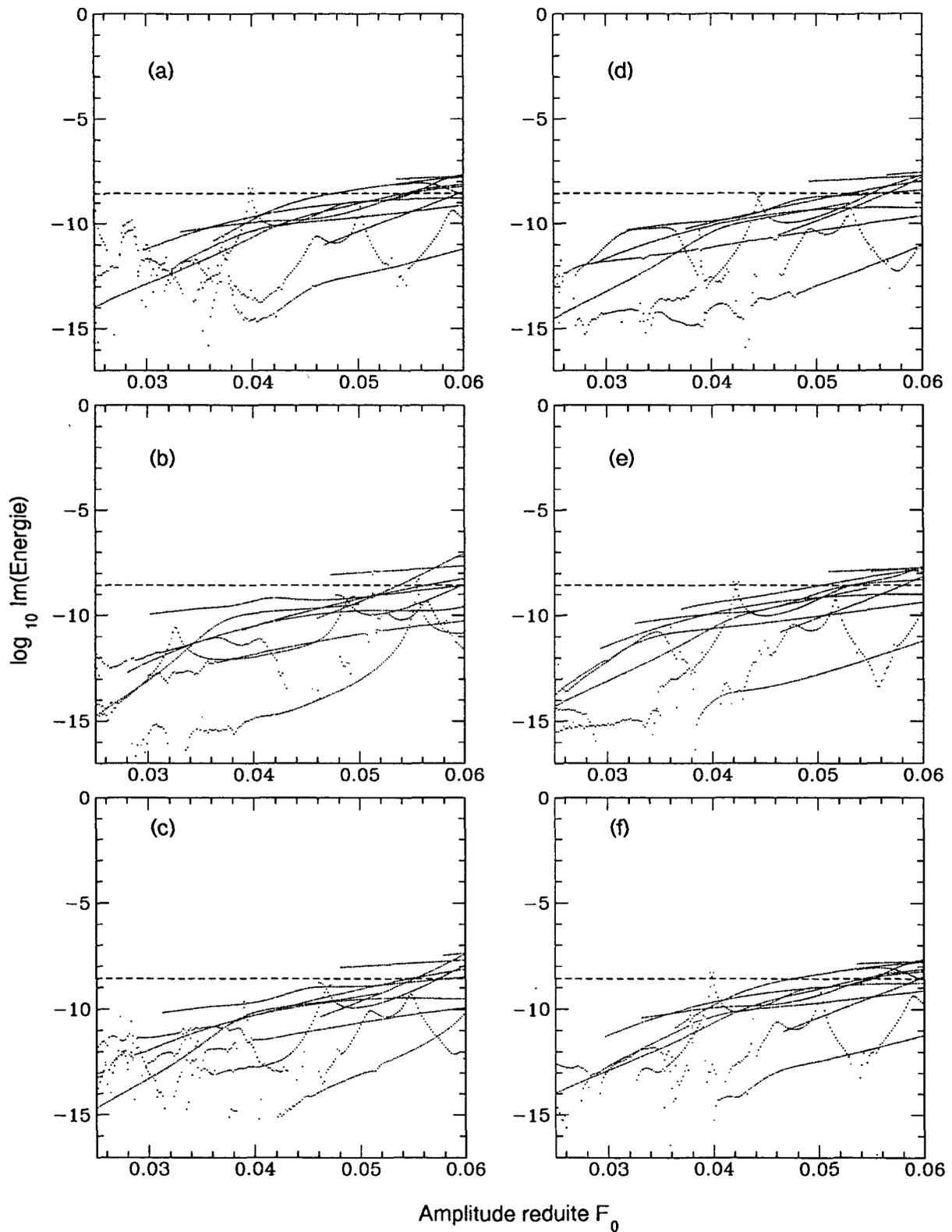


FIG. 5.10 - Dynamique des largeurs des états de Floquet avec une projection supérieure à 1% sur l'état initial $|n_0 = 23\rangle$, pour différentes valeurs de la pulsation réduite $\omega_0 =$ (a) 1.300; (b) 1.301; (c) 1.302; (d) 1.303; (e) 1.304; (f) 1.305. Noter les fluctuations très importants d'un graphe à l'autre.

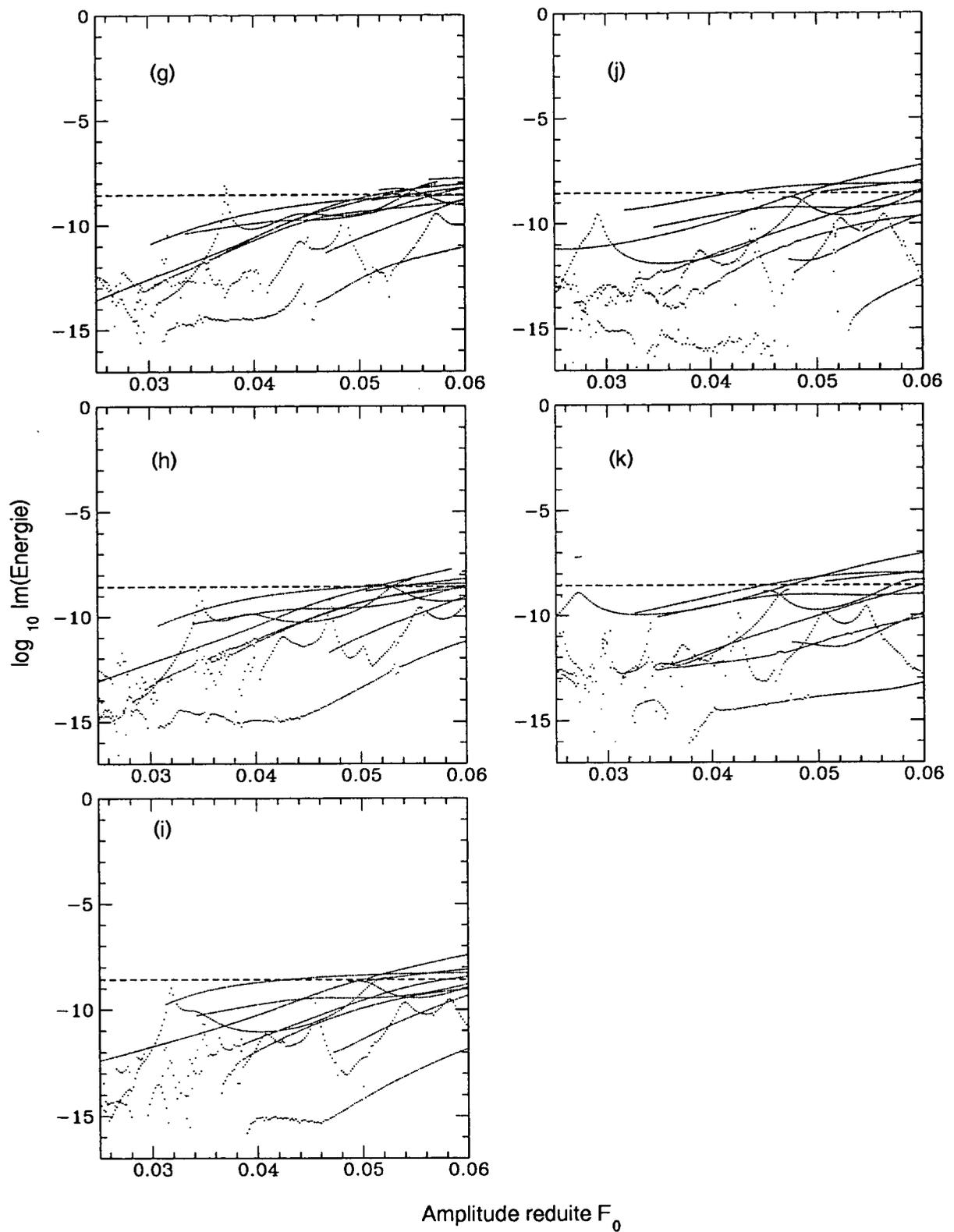


FIG. 5.11 - Suite de la figure 5.10: Dynamique des largeurs des états de Floquet avec une projection supérieure à 1% sur l'état initial $|n_0 = 23\rangle$, pour différentes valeurs de la pulsation réduite $\omega_0 =$ (g) 1.306; (h) 1.307; (i) 1.308; (j) 1.309; (k) 1.310.

lisation dynamique pour les amplitudes F_0 à considérer, ainsi que la présence de ces “fluctuations universelles” dans le modèle unidimensionnel, sur une échelle de $\delta\omega_0 \simeq 1 \times 10^{-3}$ pour $n_0 = 23$.

A cause de l’effort de calcul très important pour générer des figures comme celles représentées ci-dessus, nous n’avons pas encore pu faire une étude pour le cas de l’atome tridimensionnel, afin de tester un éventuel effet de moyennage sur l’amplitude des fluctuations et/ou de modification de l’échelle caractéristique $\delta\omega_0$ de ces fluctuations.

5.5.3 La dynamique des niveaux au voisinage de $n_0 = 62$

Nous allons finir ce paragraphe avec une étude des probabilités d’ionisation en fonction de F_0 au voisinage de $n_0 = 62$, dans le modèle unidimensionnel. Rappelons (cf. 5.4.1 et 5.4.2) que c’est exactement la position de la “stabilité anormale” de Koch et al.[10].

La figure 5.12 montre les signaux d’ionisation pour $n_0 = 61$ ((a)), $n_0 = 62$ ((b)) et $n_0 = 63$ ((c)), tels qu’ils sont obtenus d’une simulation pour les paramètres expérimentaux du groupe de Stony Brook. Ils représentent ainsi les courbes dont on avait extrait les valeurs du seuil montrées sur les figures 5.5, 5.6 et 5.7.

On voit tout de suite l’origine de la chute abrupte de $F_0(10\%)$ en fonction de ω_0 à $\omega_0 \simeq 1.3$: Il y a une structure non-monotone très prononcée du signal d’ionisation à $F_0 \simeq 0.04 \dots 0.045$ qui s’annonce déjà à $n_0 = 61$ (correspondant à une pulsation réduite de $\omega_0 \simeq 1.24$), qui est dominante à $n_0 = 62$ ($\omega_0 \simeq 1.3$), et qui disparaît, accompagnée d’une chute de $F_0(10\%)$ d’environ 0.012 par rapport à $n_0 = 61$, à $n_0 = 63$. Ce caractère non-monotone domine largement les autres pointes plus étroites qu’on observe et qui sont une simple conséquence d’avoir augmenté la valeur de n_0 par rapport au résultats montrés aux figures 5.8 à 5.11.

Les figures 5.13 à 5.15 montrent les détails de cette structure non-monotone sur une échelle plus petite, en comparaison avec la dynamique des niveaux de quasiénergie associés. Le maximum local de la probabilité d’ionisation de $n_0 = 61$ sur la figure 5.13 (a), à $F_0 \simeq 0.04$, est du à un anticroisement à ($F_0 \simeq 0.04$, $\text{Re}\epsilon \simeq -1.318 \times 10^{-4}$ a.u.), à peine visible en (c), et associé à la pointe très prononcée formée des largeurs correspondantes en (b).

Exactement le même anticroisement est responsable de l’extremum local (le plus prononcé dans les trois figures 5.13 à 5.15) de la probabilité d’ionisation de l’état $n_0 = 62$, sur la figure 5.14. Qu’il se trouve maintenant à une valeur $F_0 = 0.043$ distincte de celle de son homologue pour $n_0 = 61$ est une simple conséquence des lois d’échelle (3.19), ensemble avec le changement de n_0 .

Notons que les trois spectres montrés sur les figures 5.13 à 5.15 ((b) et (c)) sont *strictement* identiques (comme la valeur physique de la pulsation du champ est la même pour toutes les trois figures), au choix de la zone de Floquet autour de l’état initial $|n_0\rangle$ près.

La figure 5.15 finalement montre une stabilité nettement plus faible de l’état $n_0 = 63$ par rapport à $n_0 = 62$ et $n_0 = 61$. L’anticroisement qui avait induit les extrema dominants dans les signaux d’ionisation de $|n_0 = 61\rangle$ et de $|n_0 = 62\rangle$

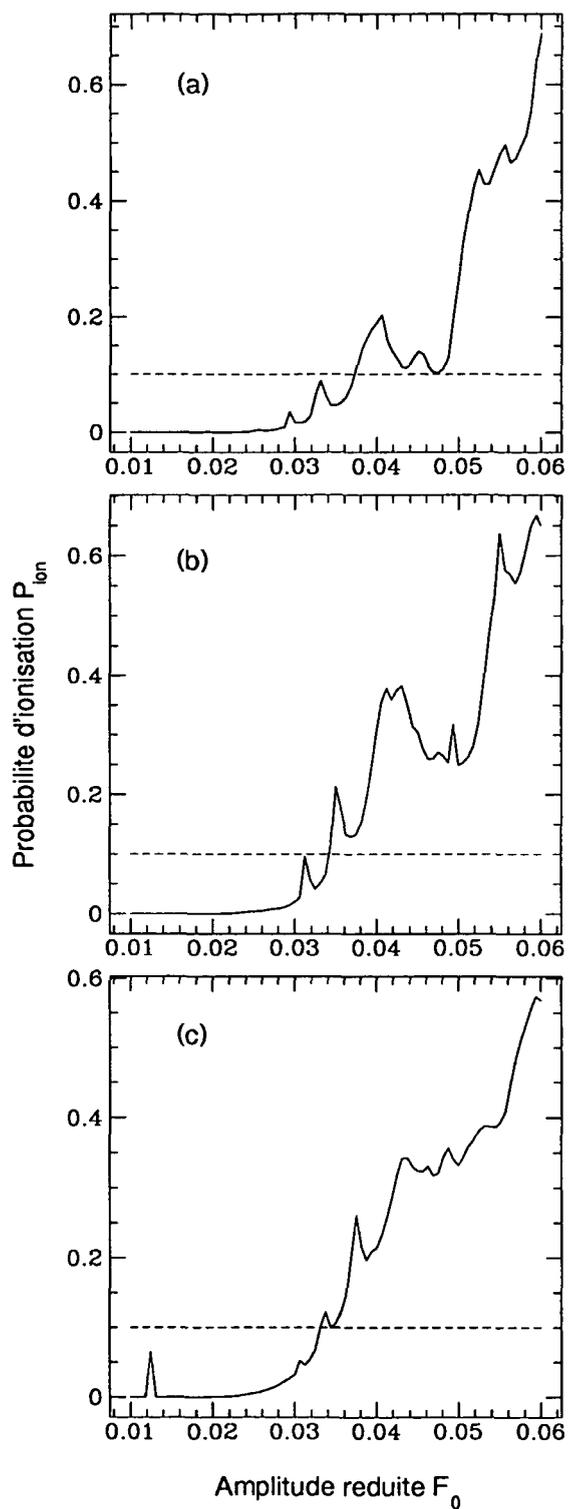


FIG. 5.12 - Signaux d'ionisation de l'état (a) $|n_0 = 61\rangle$, (b) $|n_0 = 62\rangle$ et (c) $|n_0 = 63\rangle$, exposé à un champ de micro-onde de fréquence $\omega/2\pi = 36.02$ GHz. Temps d'interaction avec la micro-onde: $t = 9.1 \times 10^{-9}$ s.

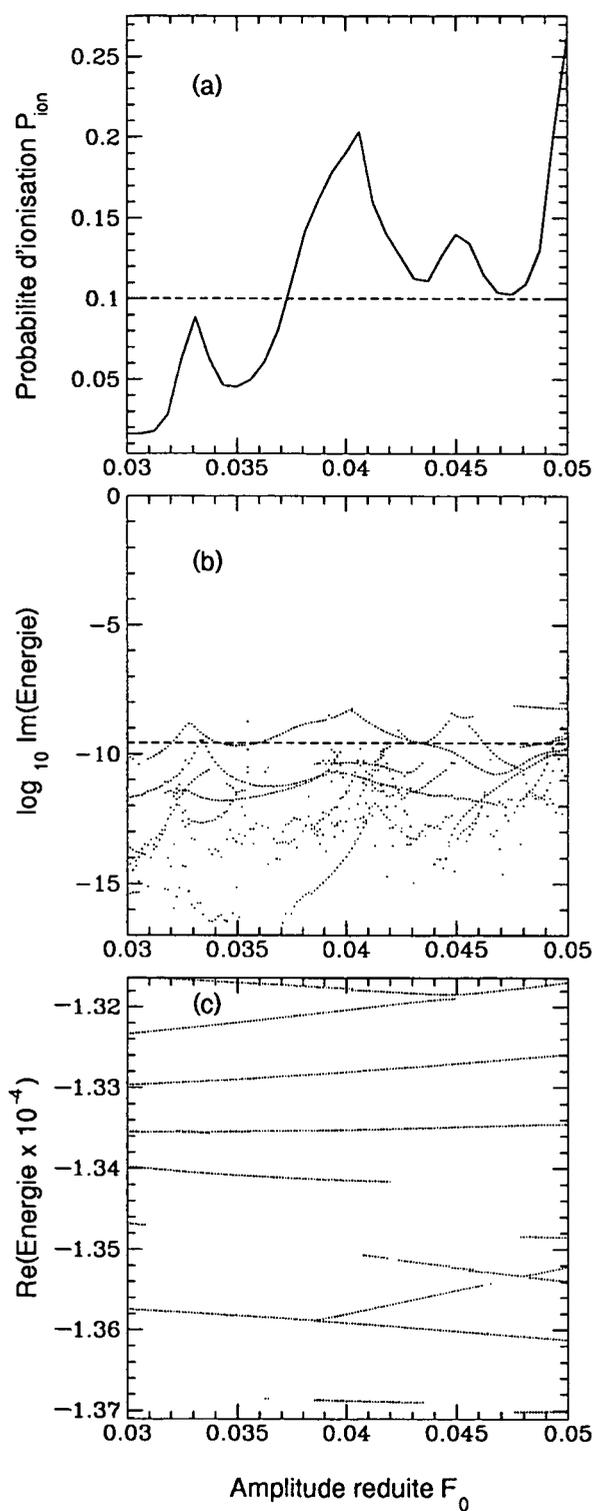


FIG. 5.13 - Ionisation de l'état $|n_0 = 61\rangle$ par un champ micro-onde de fréquence $\omega/2\pi = 36.02$ GHz. (a) Détail de la figure 5.12 (a), en comparaison avec la dynamique des largeurs (b) et des parties réelles (c) des quasiénergies associées aux états de Floquet possédant un recouvrement $\geq 5\%$ avec l'état initial.

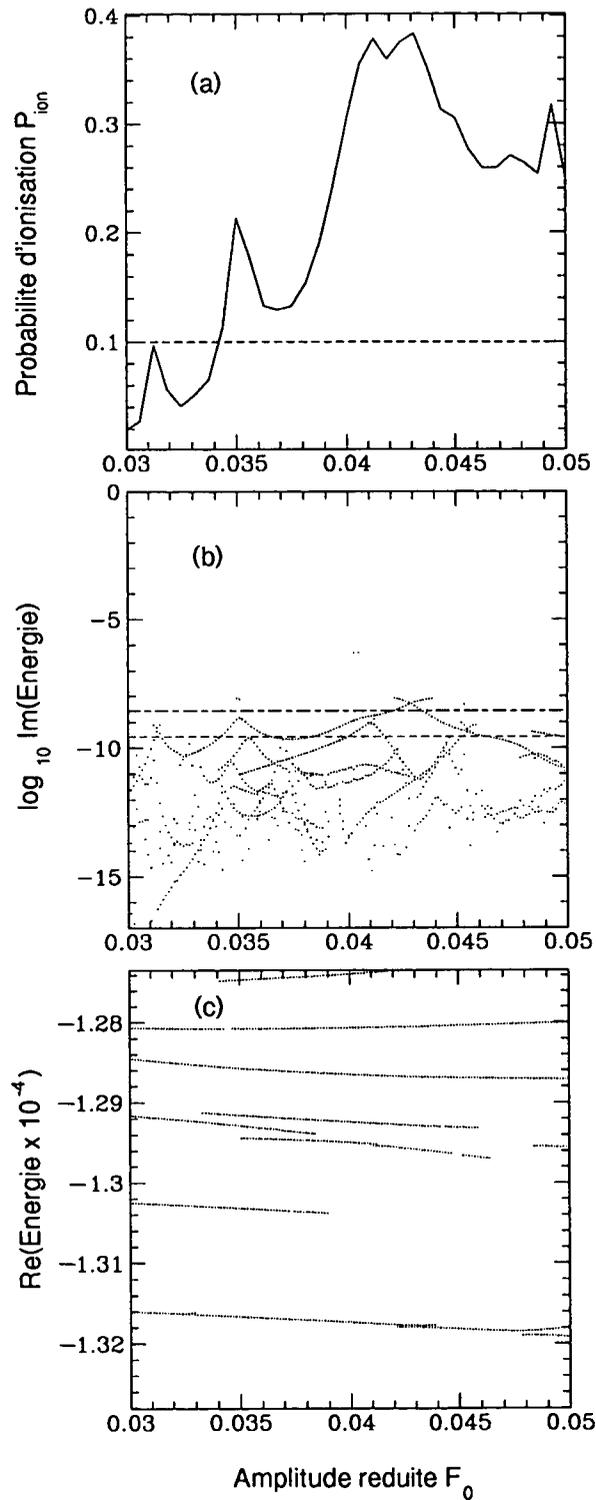


FIG. 5.14 - Ionisation de l'état $|n_0 = 62\rangle$ par un champ micro-onde de fréquence $\omega/2\pi = 36.02$ GHz; (a)-(c) comme sur la figure 5.13. Le trait pointillé-interrompu sur la figure (b) marque la valeur critique de la partie imaginaire des quasiénergies correspondant à un taux d'ionisation de 10% pendant un temps d'interaction de 4.6×10^{-10} s, en comparaison avec le trait interrompu qui marque le même taux pour $t = 9.1 \times 10^{-9}$ s. (a) a été obtenu pour la dernière valeur de t . Noter la marginalisation progressive du rôle des anticroisements des niveaux de quasiénergie pour un raccourcissement de t . Voir aussi la section 5.6.1 pour une discussion détaillée du rôle de t pour $P_{ion}(F_0)$.

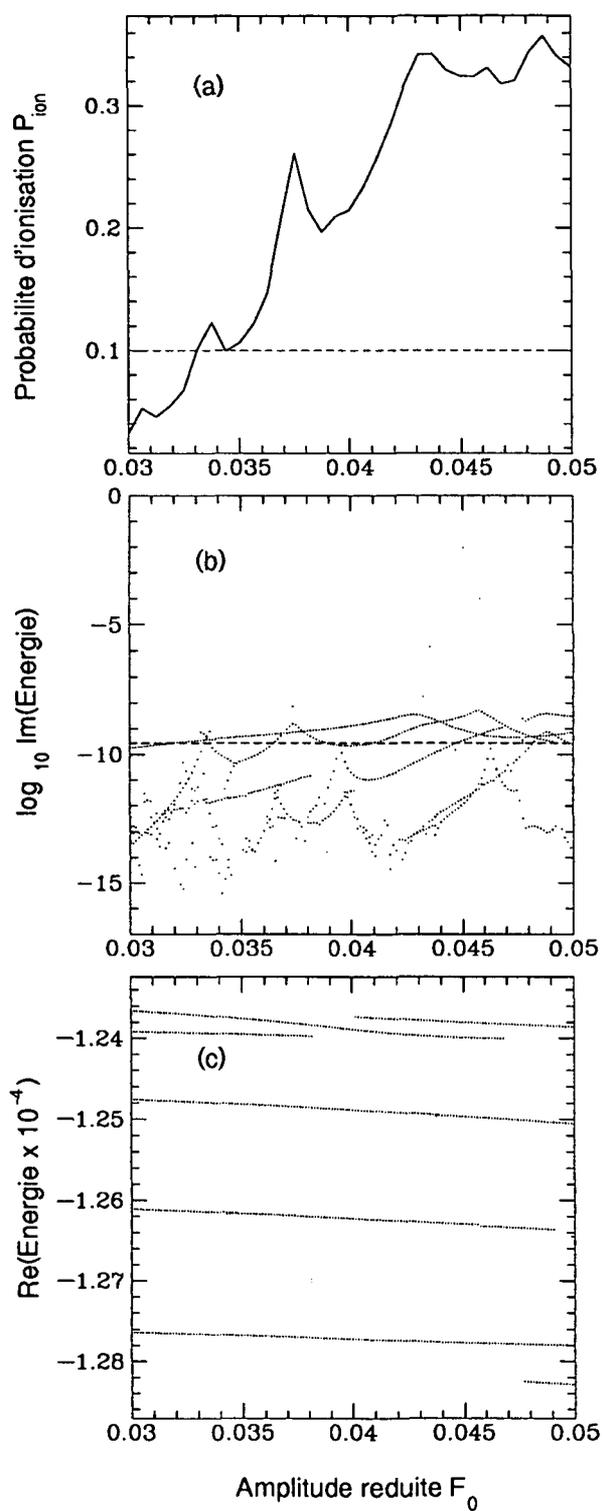


FIG. 5.15 - Ionisation de l'état $|n_0 = 63\rangle$ par un champ micro-onde de fréquence $\omega/2\pi = 36.02$ GHz; (a)-(c) comme sur la figure 5.13.

subsiste (à $F_0 \simeq 0.0457$ et avec le prolongement adiabatique de l'état $|n_0 = 63\rangle$, à $\text{Re}\epsilon \simeq -1.264 \times 10^{-4}$). Pourtant, il n'a plus d'impact visible sur le signal d'ionisation dans la figure (a), car le couplage qu'il induit est négligeable devant la contributions d'autres états de Floquet à l'ionisation.

On peut donc supposer que c'est le couplage des états $|n_0 = 61\rangle$ et $|n_0 = 62\rangle$ avec l'état de Floquet issu de $|n_0 = 63\rangle$ qui induit une déstabilisation de ces états. Celle-ci se manifeste par les structures non-monotones observées dans le signal d'ionisation [136].

Notons que *l'identité* des deux anticroisements dominant localement l'ionisation des états $|n_0 = 61\rangle$ et $|n_0 = 62\rangle$ *n'est pas* en contradiction avec l'observation des "fluctuations de conductivité" (cf. 5.5.2) : Bien que $n_0 = 61$ corresponde à $\omega_0 \simeq 1.24$ et $n_0 = 62$ à $\omega_0 \simeq 1.3$, la pulsation physique ω est *constante* ici. En opposition avec les "fluctuations de conductivité" : là, nous avons changé ω (ou ω_0) à une valeur de $n_0 = 23$ *constante*!

La dépendance sensible (et discontinue sur une échelle plus grande que $\delta\omega_0 \simeq 1 \times 10^{-3}$) de la position des anticroisements avec la pulsation (à n_0 fixé), d'un côté, et l'évolution quasi continue des extréma locaux de la probabilité d'ionisation en fonction de n_0 (à ω constant), de l'autre côté, apportent quand même une information importante: Les deux phénomènes montrent que la dynamique des niveaux ne peut *pas* être entièrement décrite en fonction de la pulsation réduite. Les deux effets observés doivent être d'origine purement quantique.

5.5.4 La dynamique des niveaux et la stabilité anormale de Koch et al.

Dans les figures 5.5, 5.6 et 5.7, nous avons observé une chute abrupte de $F_0(10\%)$, juste à l'endroit de la stabilité anormale observée par Koch et al. [10], à $\omega_0 \simeq 1.3$ et $n_0 = 62$. Dans le dernier paragraphe nous avons attribué cette chute au couplage de l'état $|n_0 = 63\rangle$ aux états $|n_0 = 61\rangle$ et $|n_0 = 62\rangle$, via un anticroisement isolé dans le spectre de Floquet.

Sous condition qu'un raisonnement unidimensionnel se prête à l'interprétation des expériences tridimensionnelles [10] à Stony Brook, il fallait donc plutôt parler d'une instabilité "anormale" à $n_0 = 63$ que d'une "stabilité" à $n_0 = 62$ ou $n_0 = 61$.

Pourtant, l'attention des expérimentateurs a été attirée par le désaccord notable entre le seuil d'ionisation prévu par la dynamique classique et celui des atomes réels. Dans l'intervalle $n_0 = 57 \dots 63$, le seuil expérimental est systématiquement plus grand que la prévision classique, avec un maximum de l'écart quantique-classique à $n_0 = 62$. En revanche, il y a un très bon accord quantique-classique uniquement à la valeur $n_0 = 64$.

De plus, les expériences montrent que cette structure locale de $F_0(10\%)$ en fonction de ω_0 obéit aux lois d'échelle classiques (3.19) dans une gamme de fréquences $\omega/2\pi = 26.43 \text{ GHz}, \dots, 36.02 \text{ GHz}$. Cela a motivé l'explication de cette "stabilité anormale" par une cicatrice de la fonction d'onde le long d'une orbite classique instable (cf. 1.1.2, 3.3, 6.2.4) dans l'espace des phases classique

[10, 36, 42].

Pourtant, l'observation de l'obéissance aux lois d'échelle classiques (3.19) s'applique - dans les limites de la précision expérimentale - non seulement à la structure au voisinage de $n_0 = 62$ mais aussi aux courbes expérimentales toutes entières, ce qui ne permet pas à notre avis d'attribuer une importance singulière à la "stabilité anormale". Ceci d'autant plus que les conditions initiales des expériences de Koch et al.[132] (notamment l'état initial dans lequel les atomes sont préparés avant l'interaction avec la micro-onde) ne sont pas suffisamment bien définies. Elles ne permettent pas la mise en évidence de certaines structures singulières de l'espace des phases ainsi que des fonctions d'onde par une telle mesure du seuil $F_0(10\%)$ ou de la probabilité d'ionisation P_{ion} . Les deux dernières sont elles-mêmes des quantités qui impliquent *a priori* des sommes incohérentes (4.61) et donc des moyennes sur plusieurs des états propres du système!

Une comparaison *quantitative* avec des études *unidimensionnelles* [36, 37, 42], en citant par exemple l'importance de l'enveloppe de l'impulsion du champ, qui définirait les conditions initiales pour l'interaction pendant la partie d'amplitude constante de l'impulsion de micro-onde (par la vitesse de passage par les différents anticroisements du spectre), semble complètement erronée pour une expérience dont on connaît si mal l'état initial. La "reproduction"[36, 37, 42] des expériences "tridimensionnelles" ("3D"[10]) par des simulations unidimensionnelles qui jouent en plus sur certains paramètres libres (tel que le temps d'interaction dans la simulation numérique [36, 42]), et notamment des seuils $F_0(10\%)$ de l'ionisation d'un ensemble d'états tridimensionnels, à une précision proche de celle indiquée par les expérimentateurs, ne peut donc au mieux être attribuée qu'à une coïncidence qui ne permet *certainement pas* l'identification d'une structure style cicatrice d'une fonction d'onde *individuelle* à l'origine de la "stabilité anormale". Par conséquent, aussi l'interprétation des résultats expérimentaux comme preuve d'un effet stabilisant des cicatrices vis-à-vis de l'ionisation [42] nous semble aller trop loin. Bien qu'il n'y ait aucun doute sur la participation aussi de fonctions d'onde montrant des cicatrices à la dynamique quantique du système considéré, il n'y *aucune* évidence *rigoureuse* pour une relation bijective entre la population d'une telle fonction d'onde et la stabilité à $n_0 = 62$.

Nous reviendrons à l'interprétation de la "stabilité anormale" par des structures elliptiques ou hyperboliques de l'espace des phases à l'avant-dernier paragraphe de ce chapitre (cf. 5.7.2). Nous étudierons là les distributions de Husimi des états de Floquet (cf. 4.4.3) du problème. Cela nous permettra une interprétation de la "stabilité anormale" qui est différente de l'hypothèse des cicatrices, sous réserve de l'applicabilité du modèle unidimensionnel.

5.6 Signaux et seuils d'ionisation à temps d'interaction variable

Dans les deux sections précédentes, nous avons étudié la dépendance des signaux d'ionisation ainsi que du seuil d'ionisation avec la pulsation du champ

micro-onde et le nombre quantique principal. Ces deux paramètres sont ceux qui sont typiquement changés dans la plupart des expériences actuelles dans ce domaine.

Pourtant, il y a un troisième paramètre qui reste, le temps d'interaction t . Comme la théorie de la localisation dynamique [7] prédit une dépendance négligeable de $F_0(10\%)$ avec t , on ne s'attendait pas à des effets intéressants induits par la variation du temps d'interaction.

Nous présentons ici la première étude théorique systématique de la dépendance temporelle du signal et du seuil d'ionisation, pour deux raisons:

- Nous allons tester l'influence d'un changement de t sur les structures non-monotones du signal d'ionisation (plus précisément sur celle observée à la figure 5.12).
- Nous nous intéressons à la dépendance temporelle de $F_0(10\%)$, sur plusieurs ordres de grandeur de t . La motivation en est une expérience sur l'ionisation des atomes de Rydberg de rubidium[32], effectuée dans le groupe de H. Walther à Garching.

5.6.1 Le temps d'interaction et la "stabilité anormale" de $n_0 = 62$

Nous commençons par l'étude de la dépendance temporelle des structures non-monotones du signal d'ionisation, à l'exemple de la structure observée dans l'ionisation de l'état $|n_0 = 62\rangle$ (cf. les figures 5.12 et 5.14).

On s'aperçoit déjà à partir des figures 5.8 à 5.11 et 5.13 à 5.15 que les différentes structures locales des signaux d'ionisation, et donc aussi de $F_0(10\%)$ en fonction de ω_0 , vont dépendre du temps d'interaction t . Celui-ci définit la valeur critique $(\text{Im}\epsilon)_{crit}$ de la partie imaginaire et donc de la largeur Γ_{crit} d'une résonance correspondant à une décroissance de 10% de l'état propre associé par

$$\Gamma_{crit} = -2(\text{Im}\epsilon)_{crit} = \frac{\ln 0.9}{t}. \quad (5.4)$$

Dans toutes les figures qui montrent la dynamique des largeurs en fonction de l'amplitude réduite, cette valeur critique a été indiquée par une ligne interrompue, comme nous l'avions mentionné.

En fait, si le temps était un paramètre libre pour nos calculs simulant l'ionisation d'un atome d'hydrogène unidimensionnel, nous pourrions facilement établir un accord presque parfait des résultats numériques 1D (cf. les figures 5.5, 5.6 et 5.7) avec les résultats expérimentaux obtenus pour l'hydrogène 3D à $n_0 = 62$. Décroître le temps d'interaction dans nos calculs correspond, d'après (5.4), à augmenter la valeur critique de la largeur $(\text{Im}\epsilon)_{crit}$ et ainsi, comme on le voit sur la figure 5.14 (b), à une marginalisation progressive du rôle de l'anticroisement dominant l'ionisation de l'état $|n_0 = 62\rangle$.

Cet effet est visualisé à la figure 5.16 où nous avons porté la probabilité d'ionisation pour trois valeurs de t différentes. (a) correspond au temps d'interaction $t \simeq 9.1 \times 10^{-9}$ s des expériences de Stony Brook, tel que nous l'avions déjà montrée dans les figures 5.12 et 5.14 (a).

La partie (b) de la figure a été obtenue pour le temps d'intégration employé dans les calculs numériques de Jensen et al. [36, 37, 42], $t \simeq 3.7 \times 10^{-9}$ s, qui reproduisent bien la stabilité locale à $n_0 = 62$ de Koch et al. [28], pourtant avec une incertitude d'environ $\Delta F_0(10\%)^{num} \simeq 20\%$ sur la valeur absolue du seuil [36, 37, 42]. Au voisinage de $F_0 = 0.05$, cela donne $\Delta F_0^{num} \simeq \pm 0.01$, correspondant à une incertitude sur la probabilité d'ionisation d'environ $\Delta P_{ion} \simeq \pm 15\%$. Dans ces limites de précision, nous pourrions en fait aussi bien donner la valeur du seuil exhibée par (b) que celle montrée par (c), où le temps d'interaction a été fixé à $t \simeq 1.9 \times 10^{-9}$ s. La dernière valeur correspond à peu près à la différence entre la valeur numérique de $F_0(10\%)$ et celle observée dans les expériences réelles à $n_0 = 62$ représentées sur la figure 5.5 et 5.6.

Notons que, parmi tous les signaux d'ionisation pour $n_0 = 57, \dots, 77$ (à $t = 9.1 \times 10^{-9}$ s) fournissant le résultat des figures 5.5 et 5.6, on n'observe *aucune* structure non-monotone qui soit comparable en largeur ou amplitude à celle à $n_0 = 61, 62$. De plus, la pente moyenne des parties croissantes des signaux d'ionisation ne dépend que très faiblement de n_0 et de t . Cela implique qu'un raccourcissement global (c'est-à-dire pour toutes les valeurs de n_0 considérées) du temps d'interaction dans la simulation numérique à la valeur employée dans la figure 5.16 (c) permettrait de maintenir non seulement le bon accord global qu'on avait observé dans les figures 5.5 et 5.6, mais aussi une très bonne coïncidence locale au voisinage de $n_0 = 62$. Avec des barres d'erreurs comparables à celles de Jensen et al. [36, 37, 42], on obtiendrait un bon accord *local* même à la valeur de t employée par ces auteurs. Pour le temps d'interaction plus court on arriverait, d'après la figure 5.16 (c), à $F_0(10\%)^{num} \simeq 0.05$, à comparer au résultat expérimental de $F_0(10\%) \simeq 0.055$.

Un tel raccourcissement du temps d'interaction t par un facteur environ 5 n'a donc *aucune* conséquence pour la comparaison *globale* du résultat des simulations unidimensionnelles avec les résultats expérimentaux 3D. Cela ne provoque qu'un décalage systématique de $F_0(10\%)$ vers des valeurs du seuil plus élevées, ce qui est consistant avec le fait que les résultats numériques de Jensen et al. [36, 37, 42] *surestiment* systématiquement le seuil expérimental. En revanche, la figure 5.16 montre sans ambiguïté qu'il est *absolument crucial* pour la détermination exacte de la position de la "stabilité anormale", c'est-à-dire de la chute abrupte de $F_0(10\%)$ en fonction de ω_0 .

La constatation de la dépendance temporelle de la position exacte de la "stabilité anormale" en ω_0 est d'une importance considérable pour l'interprétation de la stabilité à $n_0 = 61$ ou $n_0 = 62$ sur le fond d'une image semiclassique.

Si l'on attribue le désaccord entre la dynamique quantique et la dynamique classique à la résolution quantique limitée par la taille finie de \hbar , et donc à la suppression du transport quantique par des structures fractales comme des

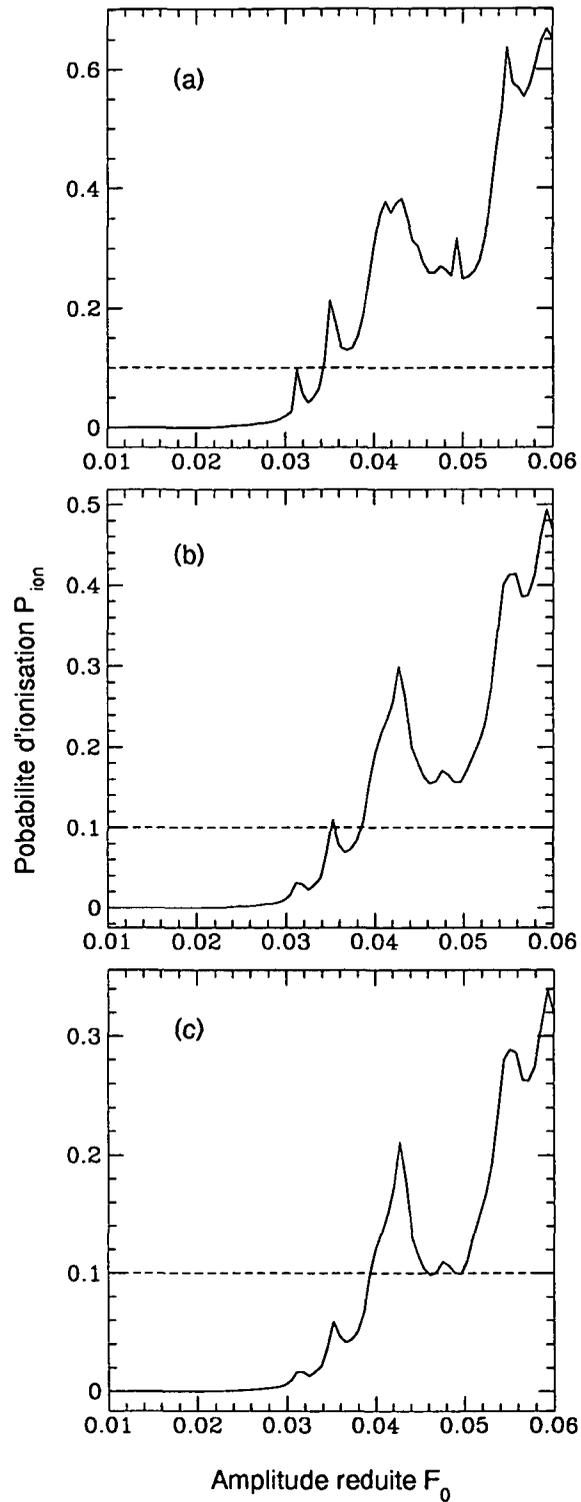


FIG. 5.16 - Signal d'ionisation de l'état $|n_0 = 62\rangle$ dans un champ micro-onde de fréquence $\omega/2\pi = 36.02$ GHz, pour différentes valeurs du temps d'interaction. $t =$ (a) 9.1×10^{-9} s, (b) 3.7×10^{-9} s, (c) 1.9×10^{-9} s.

cantores [46, 50, 51, 57] (cf. 1.1.2, 3.3), il y a des échelles de temps différentes associées aux modèles classique et quantique. La probabilité quantique restera piégée par le cantore sur un temps plus long que la probabilité classique et il y aura donc une limite *inférieure* du temps d'interaction pour qu'une fuite quantique puisse se manifester. Raccourcir le temps d'interaction par rapport à l'expérience réelle peut donc suggérer une stabilité qui n'est en fait que transitoire et liée à une échelle de temps définie par des propriétés comme la dimension fractale du cantore. Cette échelle peut être bien différente de l'échelle de temps caractérisant la décroissance globale vers le continuum.

Il est dans ce contexte important de voir que la décroissance vers le continuum est essentiellement déterminée par la distribution de la probabilité quantique *loin* (le long de l'action) de son maximum, car un temps réduit de $t_0 \simeq 1000$ implique une *petite* amplitude de la densité près du seuil effectif d'ionisation. Cela est cohérent avec les modèles semiclassiques [51, 52] qui distinguent le comportement asymptotique de la probabilité classique de celui de la probabilité quantique induit par une structure comme par exemple un cantore.

5.6.2 La dépendance temporelle du seuil d'ionisation

Le fait que la position de la "stabilité anormale" dépende du temps d'interaction, dans notre modèle unidimensionnel de l'atome, implique, comme nous l'avons déjà remarqué ci-dessus, différentes échelles de temps dominant le processus d'ionisation. La figure 5.16 montre clairement que la présence d'un anticroisement isolé se produisant à des taux d'ionisation de l'ordre de 10% induit une discontinuité dans la dépendance temporelle de $F_0(10\%)$. Nous avons constaté qu'un tel comportement est plutôt exceptionnel pour des valeurs de $n_0 \simeq 60$, ce qui explique le caractère singulier de la "stabilité anormale".

Malheureusement, il nous était jusqu'ici impossible de tester la dépendance temporelle de $F_0(10\%)$ sur un grand intervalle de t et pour des telles valeurs du nombre quantique principal, car même dans le modèle unidimensionnel, ces calculs demandent un temps très important. Nous avons donc effectué une telle étude pour l'état $|n_0 = 23\rangle$, pour différentes valeurs de la fréquence, aussi afin de permettre dans le futur une comparaison au comportement de l'atome tridimensionnel.

L'intérêt de cette étude ne réside pas seulement dans l'impact des anticroisements sur la dépendance temporelle du seuil, mais aussi à la clarification d'une question plus générale concernant une hypothèse de base de la théorie de la localisation dynamique de Casati et al.: appuyés sur une estimation semiclassique des éléments de transition au continuum d'un atome unidimensionnel [7, 39] dans un champ micro-onde, ces auteurs ont simplement négligé la décroissance associée. Cette théorie ne donne ainsi aucune prédiction sur la dépendance temporelle du seuil sauf qu'elle sera faible.

Historiquement, toutes les expériences utilisant des atomes d'hydrogène [8, 28] ne pouvaient pas changer le temps d'interaction, à cause de la vitesse des jets atomiques : il n'y avait pas de moyen de tester une telle dépendance. Pourtant,

les expériences effectuées dans le groupe de Herbert Walther à Munich, qui emploient des atomes de rubidium préparés dans un état p avec $n_0 \simeq 80$, ont mis en évidence le caractère dynamique de la localisation dynamique en changeant le temps d'interaction avec la micro-onde sur trois ordres de grandeur, de $t \simeq 10$ ns à $t \simeq 10 \mu\text{s}$ [31, 32]. Entre autre, ces auteurs ont observé une dépendance *algébrique* du seuil d'ionisation $F_0(10\%) \sim t^{-\gamma}$, avec des valeurs de γ entre $\gamma = 0.13$ et $\gamma = 0.27$ [32, 44].

Il y avait deux explications possibles pour ce phénomène: soit les largeurs des états de Floquet et donc leur couplage au continuum était à l'origine de la décroissance, soit la raison en était une petite composante de bruit ajoutée au signal cohérent de la micro-onde [140, 141, 142, 143]. Ce dernier cas avait en fait déjà été traité dans des modèles simples étudiant la stabilité de la localisation dynamique vis-à-vis d'une perturbation incohérente par une source de bruit quelconque[140, 141, 142]. Motivé par les résultats expérimentaux, l'étude d'un tel phénomène a encore été approfondie [143]. Pourtant, tous ces modèles négligeaient *a priori* le couplage au continuum.

Notre but était donc de tester dans le modèle unidimensionnel si la simple présence du continuum atomique est suffisante pour la faible décroissance de $F_0(10\%)$ et si l'on pouvait en déduire une dépendance fonctionnelle qui ressemblait à celle observée dans les expériences. On ne peut certainement s'attendre qu'à un accord qualitatif, déjà à cause de la différence de nombre quantique principal de l'état initial ainsi que de l'unidimensionalité du modèle numérique, mais surtout à cause de l'effet du coeur atomique du rubidium qui laisse plusieurs questions ouvertes à l'égard de l'interprétation quantitative des résultats de ces expériences.

La figure 5.17 montre le résultat des simulations pour quelques valeurs de la pulsation réduite entre $\omega_0 = 0.608$ et $\omega_0 = 3.0$. Sur cette représentation double-logarithmique, on voit tout de suite que $F_0(10\%)$ montre en effet une dépendance temporelle très proche d'une décroissance algébrique, sur *quatre* ordres de grandeur du temps. L'exposant γ prend des valeurs entre 0.05 et 0.09, l'effet du couplage au continuum reste donc assez faible et supporte l'hypothèse de départ de Casati et al. De plus, malgré le fait qu'on trouve des valeurs de γ systématiquement plus petites que les valeurs obtenues dans les expériences de Munich[32, 44], il s'agit d'un accord qualitatif assez surprenant qui montre que la présence de bruit n'est *pas* une condition nécessaire pour l'interprétation qualitative du phénomène observé. Notons d'ailleurs que la théorie de perturbations prévoit $\gamma = 1/2N_0$ (où N_0 désigne le nombre de photons nécessaires à l'ionisation, voir (5.1)), donc $\gamma \simeq 0.07$ pour $\omega_0 \simeq 1.6$, une valeur bien proche de l'exposant typique trouvé dans nos calculs. Pourtant, suite à la dépendance de N_0 avec la pulsation, un comportement purement perturbatif devrait fournir une dépendance systématique de γ avec ω_0 , tout au contraire du résultat de la figure 5.17.

Pourtant, il y a des fréquences exhibant des discontinuités de γ , *toujours* dues à l'émergence d'une structure non-monotone du signal d'ionisation pendant un certain intervalle de temps. La figure 5.18 montre quelques exemples d'un tel

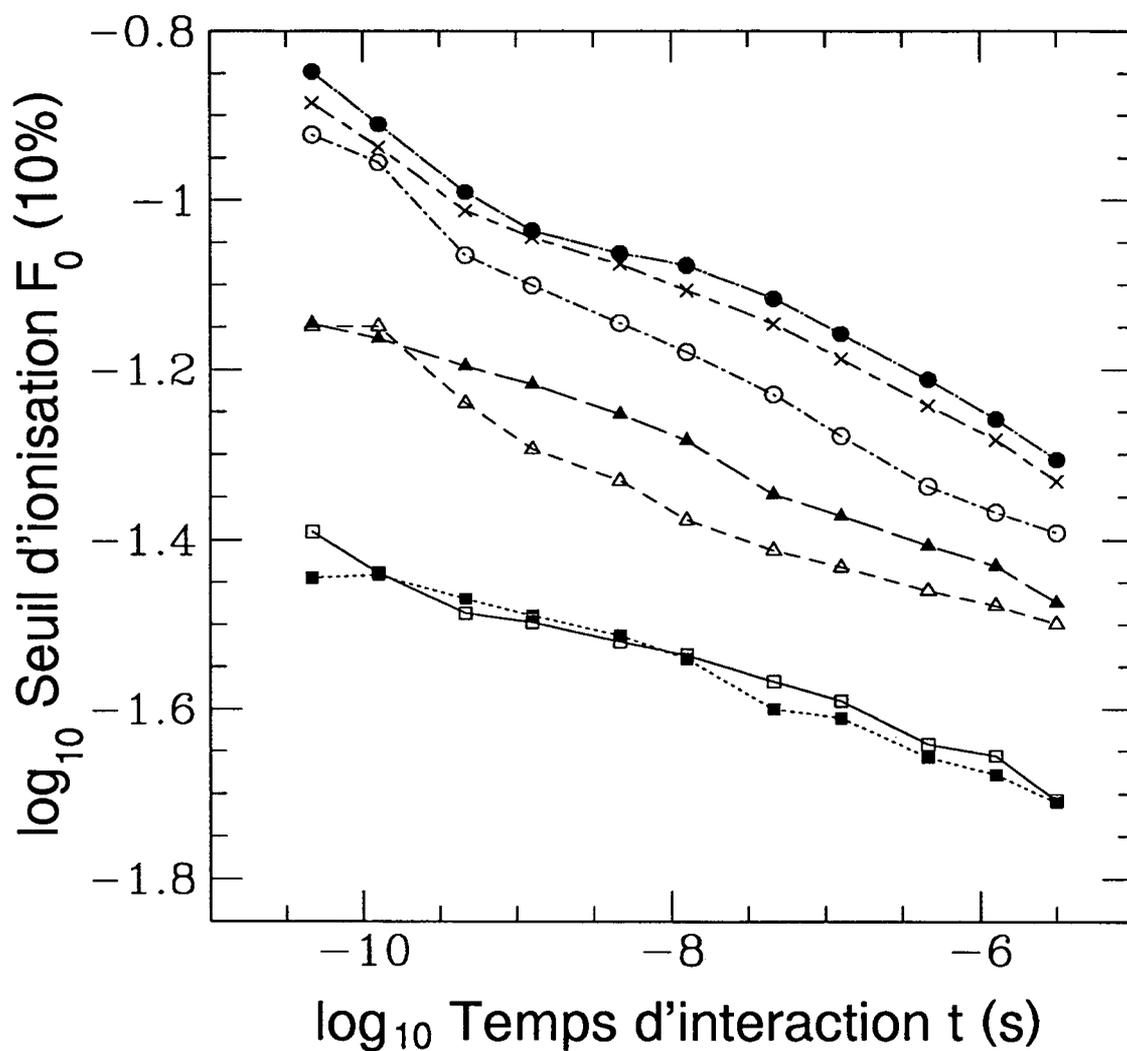


FIG. 5.17 - Dépendance temporelle du seuil d'ionisation $F_0(10\%)$ de $|n_0 = 23\rangle$, sur une échelle log-log, pour différentes valeurs de la pulsation réduite. Carrés ouverts: $\omega_0 = 0.608$, carrés pleins: $\omega_0 = 0.8$, triangles ouverts: $\omega_0 = 1.3$, triangles pleins: $\omega_0 = 1.43$, cercles ouverts: $\omega_0 = 2.0$, cercles pleins: $\omega_0 = 2.7$, croix: $\omega_0 = 3.0$. On voit très bien la décroissance algébrique sur plus de quatre ordres de grandeur du temps d'interaction.

comportement. Tandis que la figure 5.17 impliquait en gros l'indépendance des structures locales de $F_0(10\%)$ en fonction de ω_0 , par rapport à un changement du paramètre t , on rencontre ici un exemple où ces structures peuvent changer en fonction du temps, ainsi que nous l'avons aussi observé pour le cas de la "stabilité anormale" à $n_0 = 62$ plus haut. Pour les cas représentés sur cette figure seulement le lent changement de l'exposant $\gamma(\omega_0 = 2.6)$ correspond à une structure monotone de la probabilité d'ionisation. Dans les trois autres cas, le décalage subit du seuil vers des valeurs considérablement plus basses est la conséquence du passage d'un anticroisement isolé. En dehors des régions de décalage, la pente des courbes à la figure 5.18 est quand même comparable aux pentes observées à la figure 5.17.

Mais bien qu'une décroissance proportionnelle à $t^{-0.07}$ semble représenter le cas générique, on observe des exceptions dont les discontinuités de la fig. 5.18 sont peut-être les précurseurs. La figure 5.19 montre la décroissance temporelle du seuil pour les pulsations $\omega_0 = 2.47$ et $\omega_0 = 2.5$, en comparaison avec celle pour $\omega_0 = 1.43$ que nous avons déjà vue à la figure 5.17. Bien que toutes les trois courbes obéissent globalement à une décroissance monoalgébrique, il y a une augmentation notable de la valeur de l'exposant γ qui atteint $\gamma \simeq 0.2$ pour $\omega_0 = 2.5$. Ce phénomène est aujourd'hui non élucidé.

Nous n'avons pas encore pu effectuer une étude plus détaillée de la dépendance de γ en fonction de la pulsation réduite et nous nous contentons ici de sa simple observation. Elle représente pourtant un premier résultat satisfaisant pour l'éclaircissement des résultats obtenus à Munich. De plus, elle se trouve en parfaite consistance avec ce que nous avons dit sur l'apparition et la position de la "stabilité anormale" dans les simulations 1D de l'expérience de Koch et al., dans le paragraphe précédent.

Pour souligner encore une fois la *faible* dépendance temporelle du comportement du seuil $F_0(10\%)$ en fonction de ω_0 , nous finissons ce paragraphe avec une comparaison du seuil d'ionisation numérique de l'état $|n_0 = 23\rangle$ pour deux valeurs différentes de t , à la figure 5.20. De toute évidence, en dépit d'une différence de t de plus d'un facteur six, il n'y a aucun changement qualitatif du comportement du seuil d'ionisation. Uniquement à $\omega_0 = 1.18$ et à $\omega_0 = 2.5$, un changement de la structure locale peut être observé. Dans le premier cas, une structure non-monotone du signal d'ionisation se trouve à l'origine de ce changement, tandis que nous avons vu à la figure 5.19 que la pulsation $\omega_0 = 2.5$ est marquée par un exposant de la décroissance algébrique nettement plus grand que pour les autres fréquences.

Globalement, cette figure est encore une preuve de la validité des hypothèses de base de la théorie de Casati et al.[7]. La localisation dynamique reste essentiellement in affectée par un changement du temps d'interaction, même sur plusieurs ordres de grandeur du temps, comme nous l'avons vu à la figure 5.17. Seules les structures locales présentent une dépendance temporelle parfois importante.

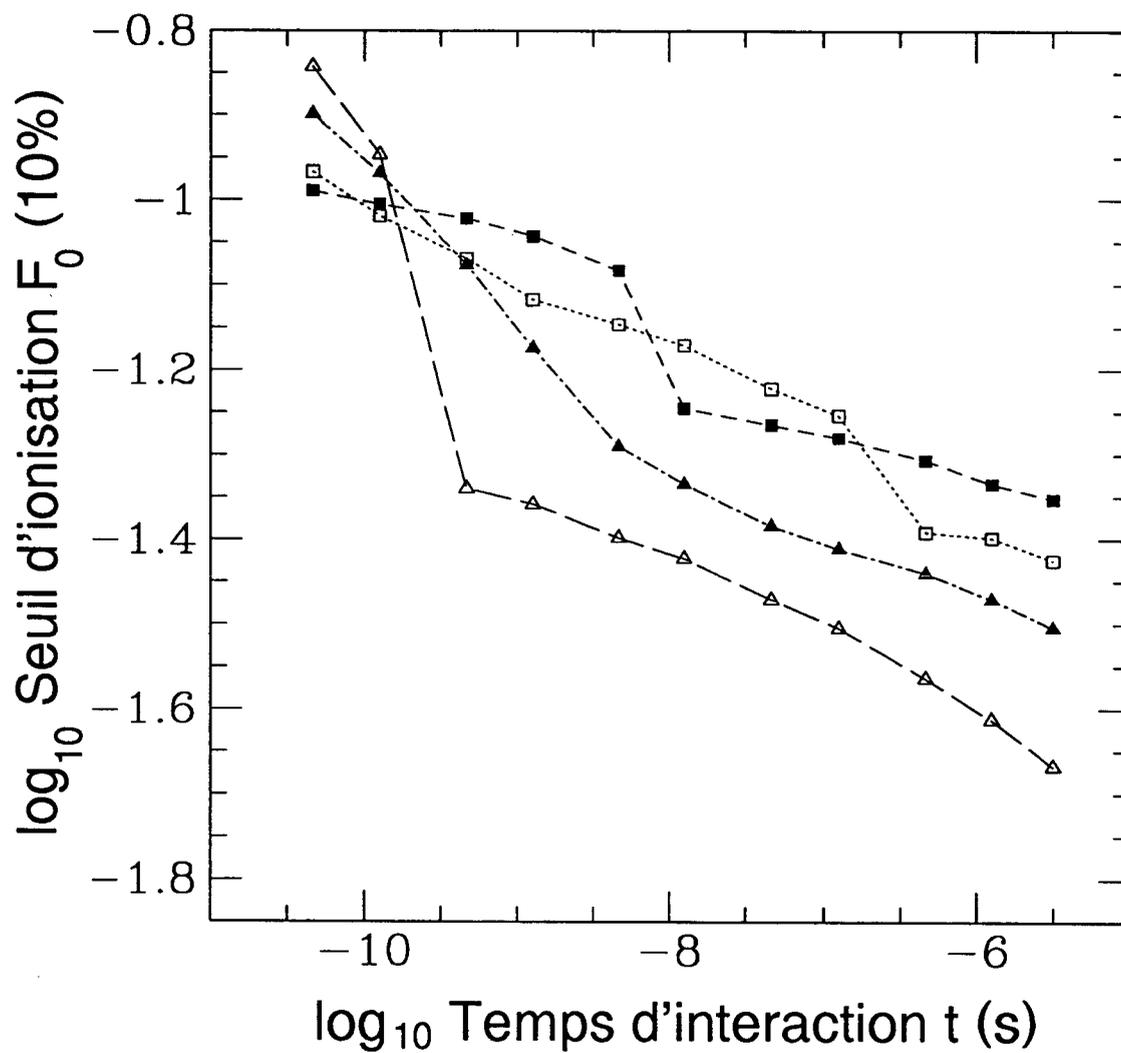


FIG. 5.18 - Dépendance temporelle du seuil d'ionisation $F_0(10\%)$ de $|n_0 = 23\rangle$, sur une échelle log-log, pour différentes valeurs de la pulsation réduite. Carrées ouverts: $\omega_0 = 2.3$, carrées pleins: $\omega_0 = 2.4$, triangles ouverts: $\omega_0 = 2.44$, triangles pleins: $\omega_0 = 2.6$.

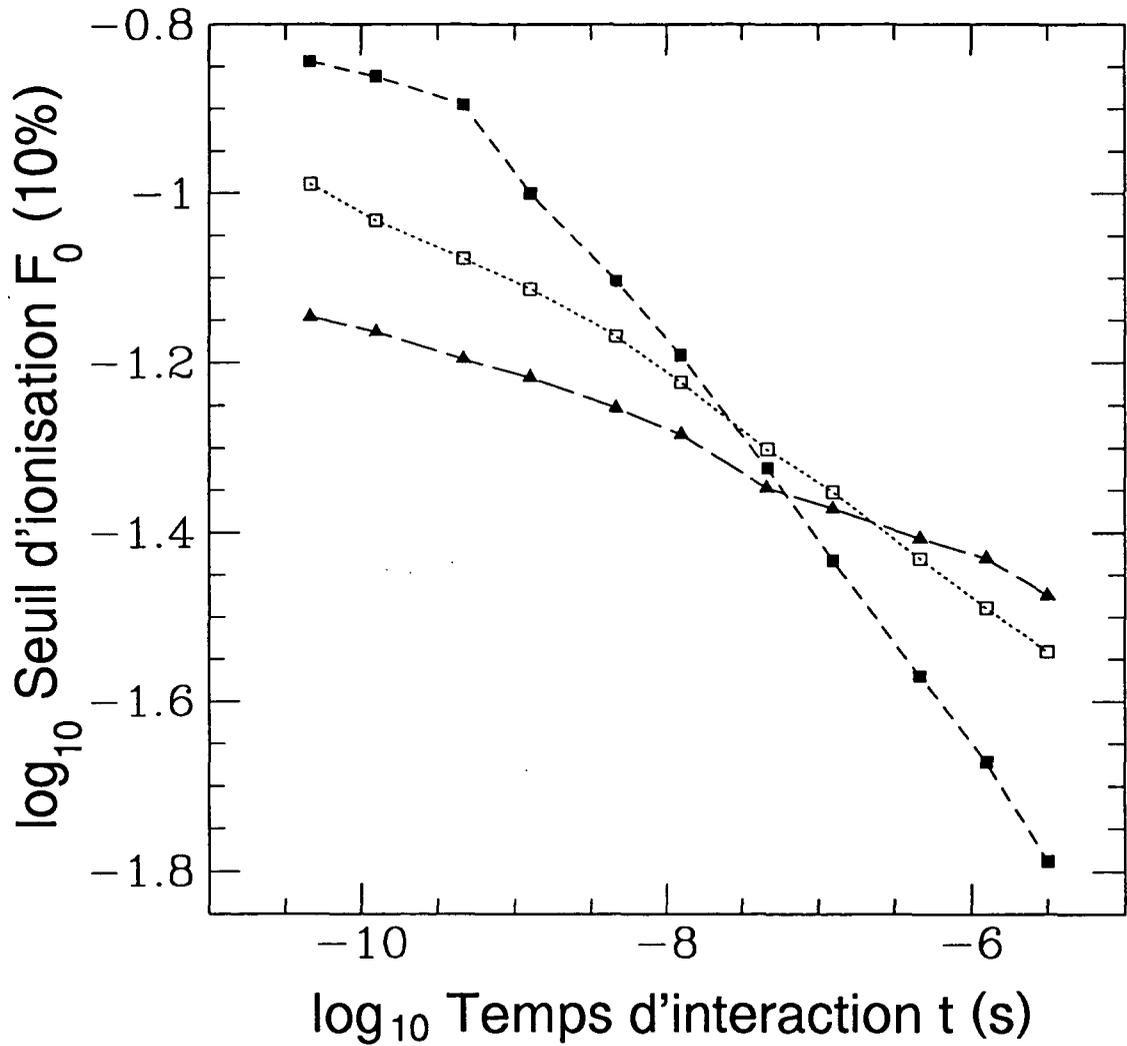


FIG. 5.19 - Dépendance temporelle du seuil d'ionisation $F_0(10\%)$ de $|n_0 = 23\rangle$, sur une échelle log-log, pour différentes valeurs de la pulsation réduite. triangles plains: $\omega_0 = 1.43$ (comme à la figure 5.17), carrés ouverts: $\omega_0 = 2.47$, carrés pleins: $\omega_0 = 2.5$.

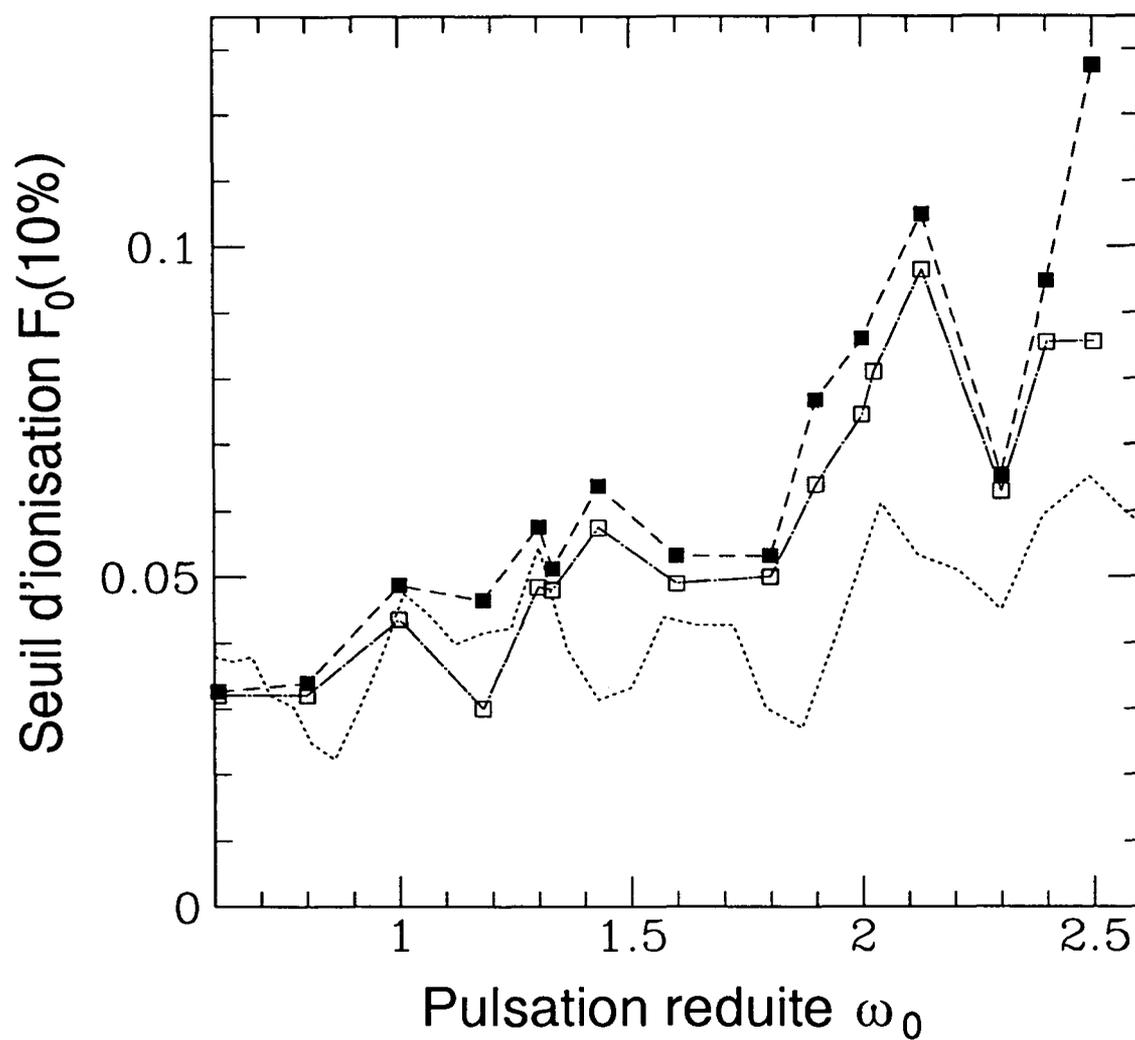


FIG. 5.20 - Simulation de l'ionisation de l'état $|n_0 = 23\rangle$ par un champ micro-onde, pour deux valeurs différentes du temps d'interaction. Carrés ouverts: $t = 2.9 \times 10^{-9}$ s, carrés pleins: $t = 4.6 \times 10^{-10}$ s. La ligne pointillée indique les résultats de Koch et al., comme à la figure 5.5.

5.7 Structures classiques et quantiques dans l'espace des phases

Pour finir notre étude du modèle unidimensionnel de l'atome, nous procédons, dans ce dernier paragraphe, à la comparaison de la dynamique quantique, et notamment des fonctions propres de notre système avec la structure de l'espace des phases classique.

Nous utilisons la représentation de Husimi des états propres, introduite dans le chapitre 4.4.3. Nous avons vu que cette représentation permet la description de la probabilité quantique en terme des variables action-angle (cf. 3.3) de l'espace des phases classique. De plus, la méthode de la rotation complexe permet l'accès direct aux largeurs des résonances de l'Hamiltonien du problème micro-onde. Les deux méthodes ensemble nous donnent ainsi la possibilité de tester la corrélation entre les propriétés de localisation des résonances dans l'espace des phases et leurs largeurs, donc leur couplage au continuum.

Une comparaison de quelques distributions de Husimi représentatives avec la représentation du même état propre dans l'espace de configuration terminera ce paragraphe.

Nous nous restreignons ici à une seule valeur de l'état initial de l'atome, $n_0 = 62$, et de la fréquence du champ micro-onde, $\omega/2\pi = 36.02$ GHz. Ces valeurs des paramètres décrivent la situation physique dans laquelle les expériences de Koch et al. [10, 28, 135] observent la "stabilité anormale" de l'hydrogène tridimensionnel [10], qui semble avoir été reproduite par les calculs unidimensionnels de Jensen et al. [36, 37, 42] (cf. 5.4, 5.5.4, 5.6.1). Pourtant, toutes les observations que nous allons faire s'appliquent aussi bien à d'autres valeurs de n_0 comme de la fréquence. Nous avons par exemple effectué des tests comparables pour $n_0 = 61$ et $n_0 = 63$ à $\omega/2\pi = 36.02$ GHz, et pour $n_0 = 23$ à $\omega_0 = 1.304$. Aussi dans le dernier cas on obtient qualitativement les mêmes résultats, à la taille effective de \hbar près, ce qui est d'ailleurs un bon argument *pour* la pertinence des lois d'échelle classiques (3.19) aussi dans la dynamique quantique.

5.7.1 Structures classiques

Avant d'étudier les propriétés du transport quantique, discutons d'abord quelques aspects clé du transport classique dans l'espace des phases. Essayons d'obtenir une idée de la "métamorphose" de l'espace des phases classique d'une structure largement régulière à une structure essentiellement irrégulière (cf. 1.1.2, 3.3).

Nous avons porté sur la figure 5.21 les sections de Poincaré pour quatre valeurs différentes de l'amplitude réduite F_0 du champ. Les sections sont représentées en coordonnées action I_u et angle Θ_u associées aux coordonnées semiparaboliques, telles que nous les avons définies dans (3.21) et (3.23), avec $I_u = I/\alpha \stackrel{(3.20)}{=} I/n_0$. La phase du champ a été fixée à $\omega_0 t_0 = 0$ dans ces figures. La collision avec le noyau est au point $\Theta_u = -\pi$ (ou $\Theta_u = +\pi$). Ces deux valeurs doivent en fait être identifiées à cause de la périodicité du problème). Le fait qu'on n'observe

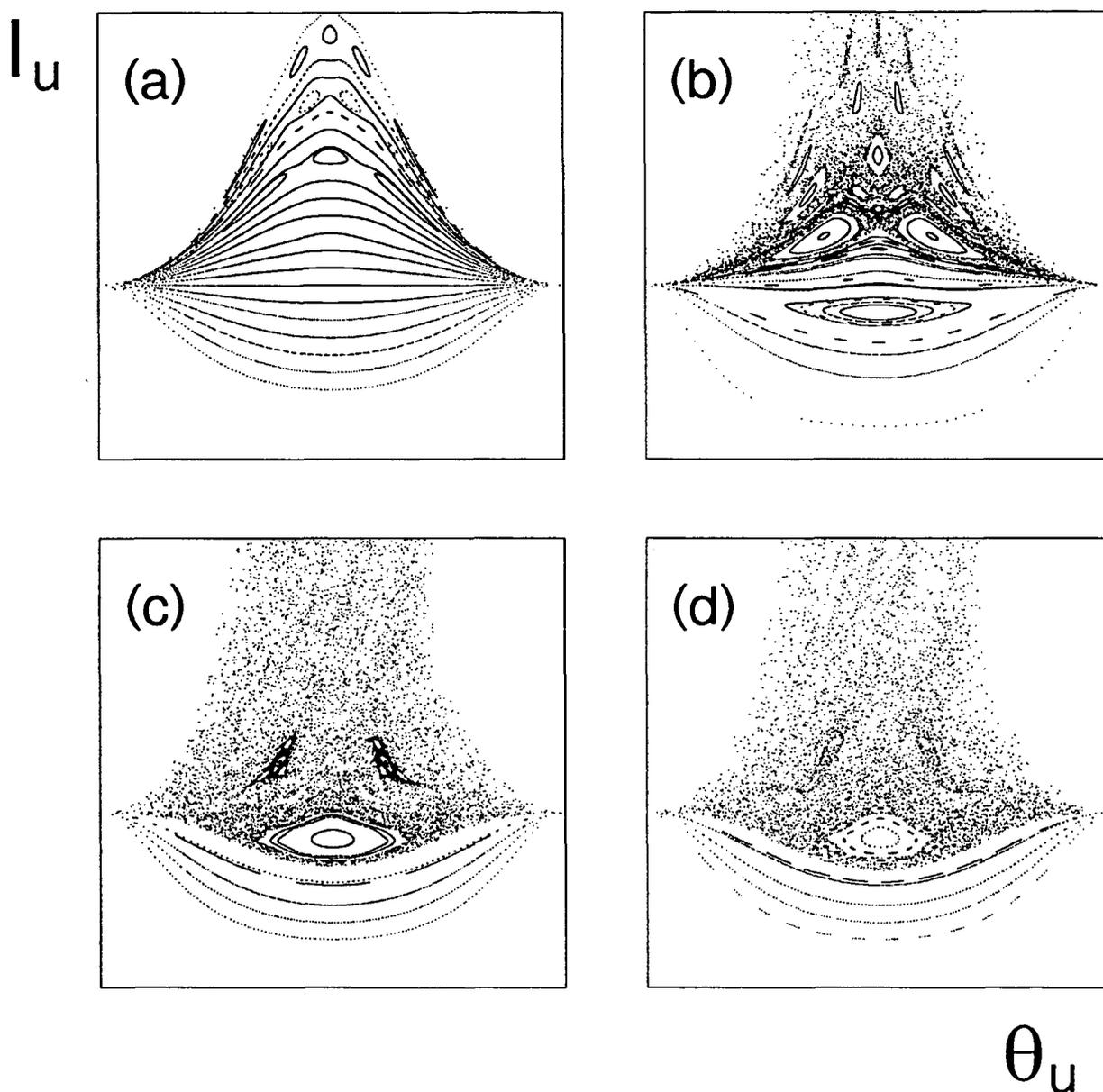


FIG. 5.21 - Sections de Poincaré de l'espace des phases représentant le mouvement classique d'un électron de Rydberg dans un champ micro-onde d'amplitude réduite F_0 et de pulsation réduite ω_0 , en coordonnées action-angle I_u et Θ_u définies d'après (3.21). $\Theta_u \in [-\pi; +\pi]$, $I_u \in [0; 2.58]$. $\omega_0 = 1.304$, $\omega_0 t_0 = 0.0$. $F_0 =$ (a) 0.001, (b) 0.01, (c) 0.035, (d) 0.05. Les conditions initiales ont été choisies pour mettre en évidence les régions de stabilité principales.

pratiquement pas de flot de probabilité en direction de I_u pour des valeurs de Θ_u voisines à $\pm\pi$ est une conséquence directe de la singularité des équations de mouvement classiques au moment du choc électron-noyau, que nous avons discutée à la fin de la section 3.3. Nous choisissons la pulsation réduite $\omega_0 = 1.304$, correspondant à la position de la “stabilité anormale” de Koch et al. [10, 28]. La valeur maximale de $I_u = 2.58$ dans ces images correspond à la valeur du seuil de continuum effectif $n_c^{sim} \simeq 133$ de nos simulations quantiques pour $n_0 = 62$ (dont nous comparerons les distributions de Husimi aux présentes sections de Poincaré; $I_u = 1.0$ correspond à l’état initial $n_0 = 62$, avec $F_0 = 0$).

La partie (a) de la figure 5.21, pour une amplitude réduite $F_0 = 0.001$, montre une structure largement régulière de l’espace des phases; seulement pour les actions très élevées, apparaissent des îlots de Birkhoff [47], par conséquence de la destruction d’une courbe invariante séparant les différentes régions de l’espace des phases.

Sur la figure (b), nous avons un joli exemple d’un espace des phases mixte, à $F_0 = 0.01$, où l’on reconnaît très bien les résonances d’ordre un (fréquence Kepler = fréquence micro-onde), deux (fréquence Kepler = $2 \times$ fréquence micro-onde), trois et quatre, ainsi que les résidus de la résonance cinq, ensemble avec des régions stochastiques pour les valeurs de I_u élevées, et quelques courbes invariantes pour les valeurs basses de l’action.

Dans la partie (c), à $F_0 = 0.035$, ce qui correspond à une valeur de l’amplitude du champ légèrement au-dessus du seuil $F_0(10\%)$ numérique (voir les figures 5.5 - 5.7, 5.12(b), 5.14), il ne reste que la résonance principale et la résonance deux entourée par une chaîne d’îlots de deuxième ordre, comme structures stables dans la partie supérieure de l’espace des phases. L’électron atomique subira donc dans ces conditions une dynamique classique essentiellement irrégulière, sauf si les conditions initiales soient choisies à l’intérieur d’une des deux résonances.

La partie (d) de la figure, avec $F_0 = 0.05$, correspond à une amplitude de la perturbation légèrement en-dessous du seuil observé expérimentalement (ainsi que dans les calculs de Jensen et al.[42]). La résonance deux a été submergée presque complètement par la “mer stochastique” (“stochastic sea”) et la seule structure stable de surface appréciable reste la résonance principale. On voit d’ailleurs bien sur cette figure que cette dernière est centrée autour d’un point avec une valeur de l’action légèrement plus petite que un. Cela traduit le fait que la résonance principale correspond à la résonance fondamentale entre la fréquence Coulombienne de l’électron de Rydberg et la fréquence micro-onde. Pour $\omega/2\pi = 36.02$ GHz, le nombre quantique principal correspondant vaut $n_0 \simeq 57 < 62$ et donc $I_u \simeq 57/62 \simeq 0.92$.

5.7.2 Structures quantiques

Nous allons maintenant comparer les sections de Poincaré de la figure 5.21 aux fonctions d’onde des résonances issues de notre diagonalisation de l’hamiltonien unidimensionnel. Pour cette comparaison, nous ne considérons que les états de Floquet correspondant à un taux d’ionisation plus petit ou égal à 10% pendant

le temps d'interaction expérimental $t = 9.1 \times 10^{-9}$ s: en effet, seuls ces états peuvent servir à conclure sur une éventuelle corrélation entre la durée de vie et leurs propriétés de localisation dans l'espace des phases. Parmi environ 200 à 300 états propres dans une zone de Floquet, on en trouve ca. 20 à 40. L'équation (5.4) fournit le critère

$$|\text{Im}\epsilon| \leq 1.4 \times 10^{-10} \quad (5.5)$$

pour la partie imaginaire de ces états.

Nous allons représenter les états de Floquet par leurs distributions de Husimi (4.72), introduites dans la section 4.4.3. Comme nous avons vu dans les chapitres 1.1.2 et 3.3, cela permet la comparaison immédiate des propriétés du transport quantique à l'excitation de l'électron classique, par le moyen d'une section de Poincaré engendrée par les variables action-angle. La distribution de Husimi a de plus l'avantage d'être positive, ce qui permet une analogie étroite entre le flot classique et le flot quantique dans l'espace des phases. Le prix à payer pour cette propriété est la résolution finie des structures d'interférence quantique par cette représentation, qui est limitée par la taille de \hbar [123]. Suite à la loi d'échelle (3.23) *non-canonique* qui induit la définition $I_u = I/n_0$ dans notre représentation de l'espace des phases en variables action-angle, la taille effective de \hbar sur ces représentations vaut $\hbar \simeq 1/n_0$.

Nous avons choisi ici une représentation des distributions de Husimi par leurs contours. Toutes ces représentations prennent en compte les contours correspondant aux plus grandes valeurs de l'amplitude de la densité de probabilité et descendant par un ordre de grandeur. Des structures d'une amplitude inférieure de plus d'un ordre de grandeur à l'amplitude maximale de la distribution ne sont ainsi pas considérées dans nos représentations. En général, on peut dire qu'aux valeurs plus faibles, toutes les structures que nous observerons sont mélangées. Quant aux parties imaginaires des valeurs propres indiquées dans les légendes des figures, il faut se rappeler que la précision des résultats numériques n'est pas meilleure que 10^{-14} et que toutes les parties imaginaires de cet ordre ou plus petites doivent donc être considérées comme négligeables. Les échelles employées dans les figures représentant des probabilités quantiques sont exactement les mêmes que celles de la figure 5.21, ce qui permet une comparaison immédiate aux sections de Poincaré.

Les structures quantiques typiques

Nous avons dessiné la distribution de Husimi à phase zéro du champ sur les figures 5.22 à 5.26, suivant l'ordre croissant des largeurs. Sur les figures 5.22 à 5.24, à $F_0 = 0.035$, nous montrons 18, sur les figures 5.25 et 5.26, à $F_0 = 0.05$, 12 résonances qui obéissent à l'inégalité (5.5). Ces distributions représentent *toutes* les allures typiques qu'on rencontre parmi les états de durée de vie suffisamment longue.

Nous pouvons distinguer en gros quatre classes d'états de Floquet qui survi-

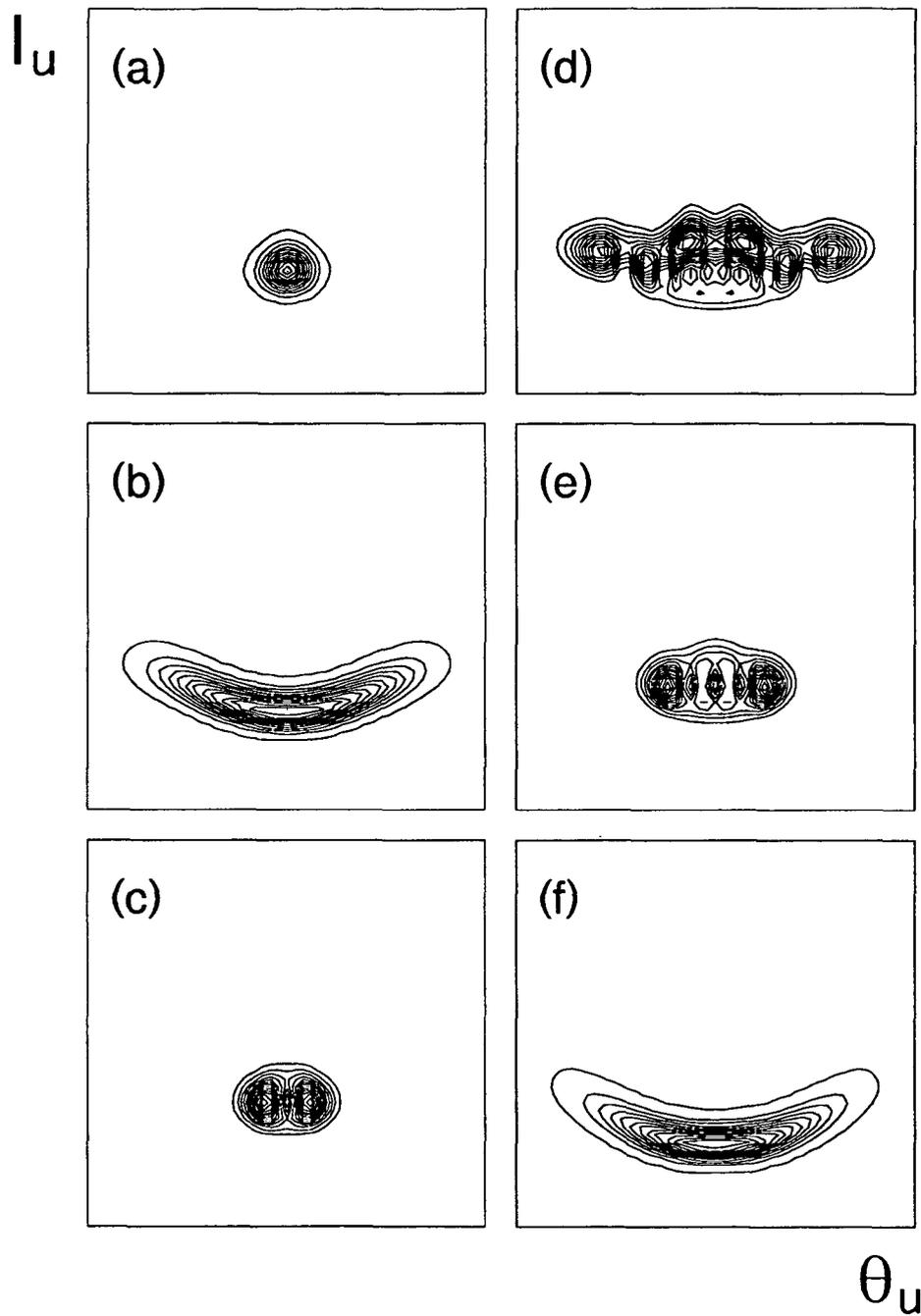


FIG. 5.22 - Représentations de Husimi (densité de probabilité dans l'espace des phases) des résonances ayant une largeur $|\text{Im}\epsilon| \leq 1.4 \times 10^{-10}$, ordonnées suivant leurs durées de vie décroissantes. Les échelles sont les mêmes que celles employées à la figure 5.21. $F_0 = 0.035$, $\omega/2\pi = 36.02$ GHz. $|\text{Im}\epsilon| \simeq$ (a) 10^{-17} , (b) 2.6×10^{-15} , (c) 7.6×10^{-15} , (d) 3.5×10^{-14} , (e) 6.9×10^{-14} , (f) 8.1×10^{-14} .

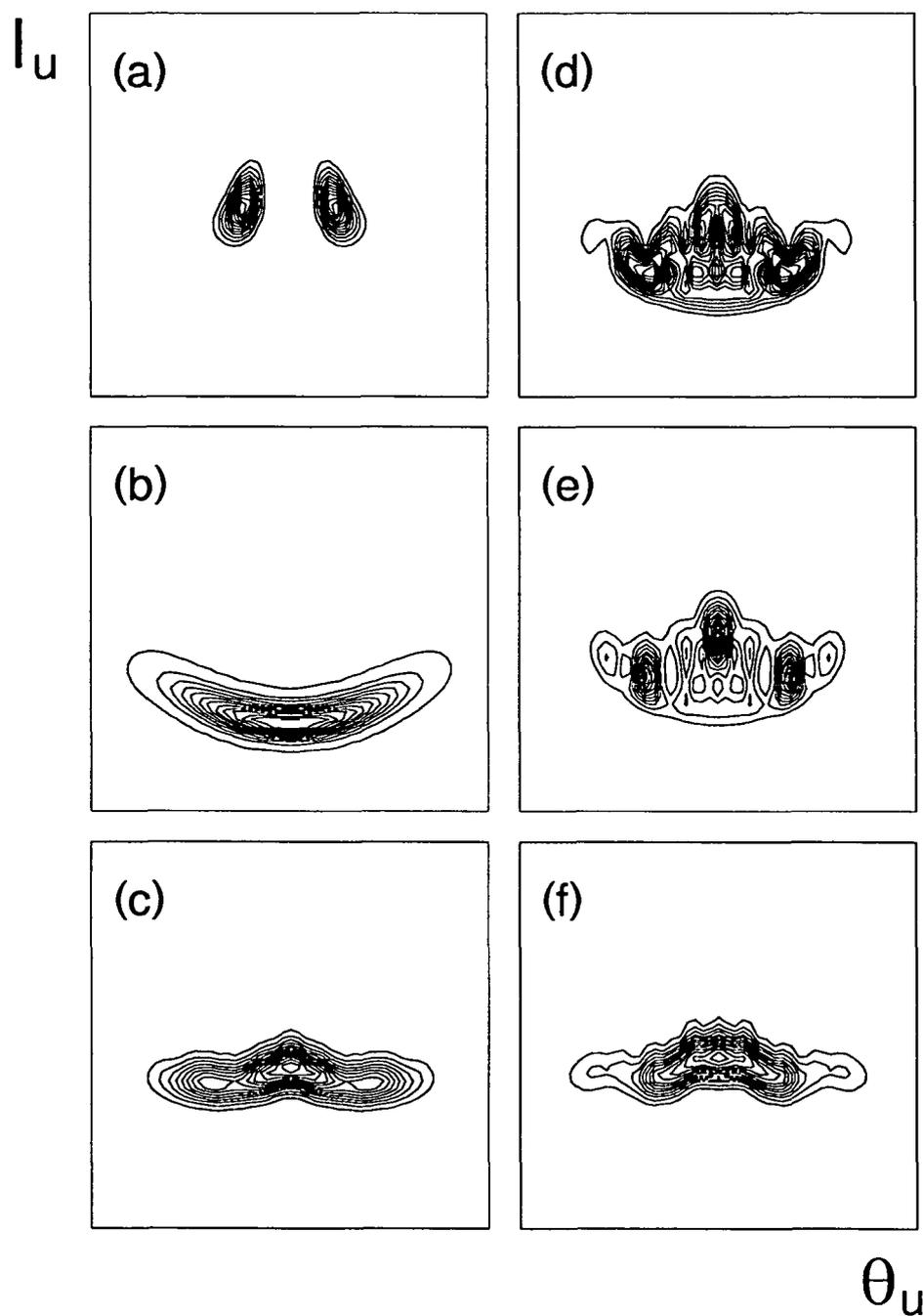


FIG. 5.23 - Suite de la figure 5.22, pour les même valeurs de F_0 et $\omega/2\pi$. $|\text{Im}\epsilon| \simeq$
 (a) 1.0×10^{-13} , (b) 3.3×10^{-13} , (c) 3.7×10^{-14} , (d) 2.8×10^{-12} , (e) 5.0×10^{-12} ,
 (f) 9.0×10^{-12} .

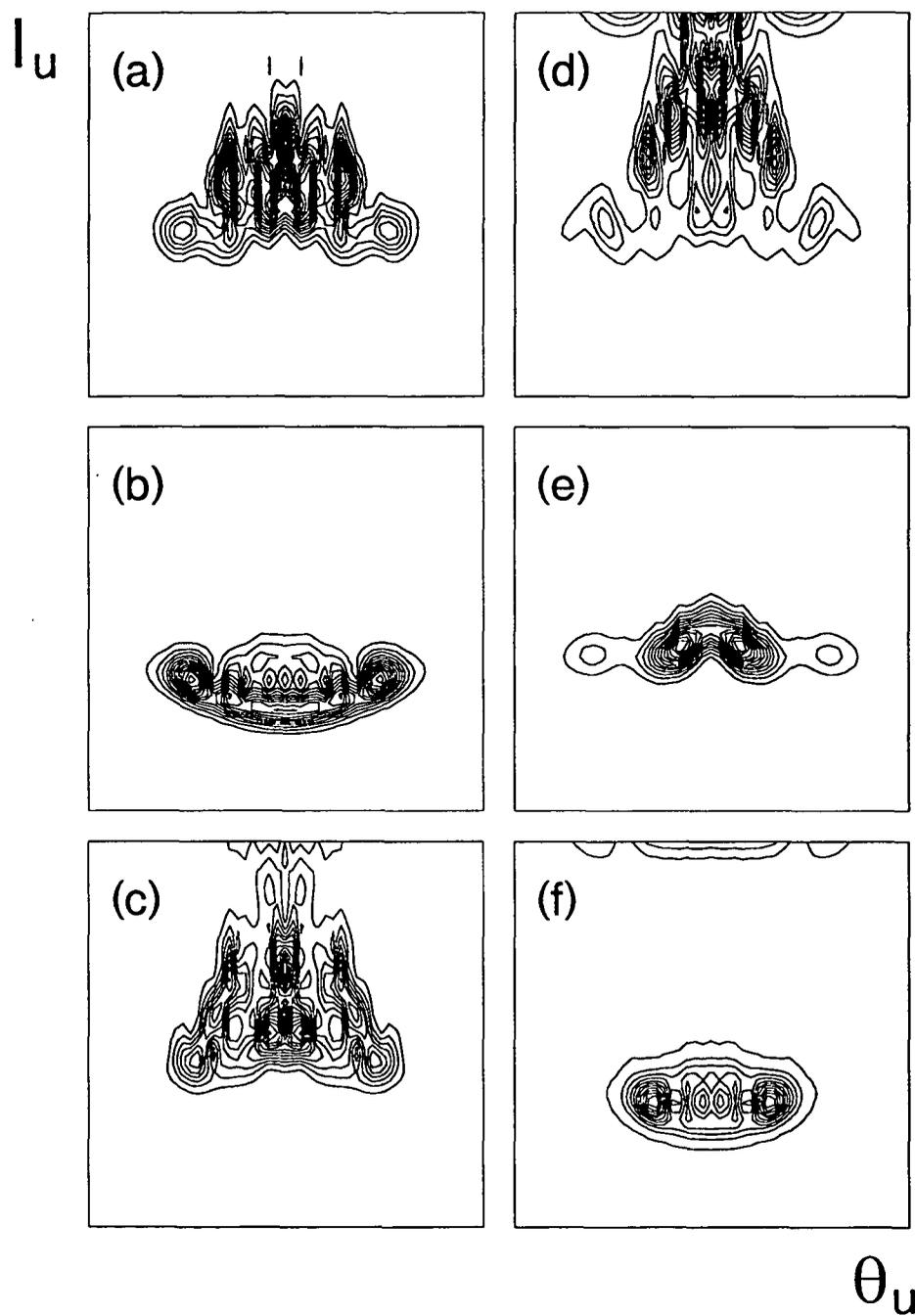


FIG. 5.24 - Suite de la figure 5.23, pour les mêmes valeurs de F_0 et $\omega/2\pi$. $|\text{Im}\epsilon| \simeq$
 (a) 1.1×10^{-11} , (b) 1.2×10^{-11} , (c) 1.8×10^{-11} , (d) 2.1×10^{-11} , (e) 2.2×10^{-11} ,
 (f) 8.0×10^{-11} .

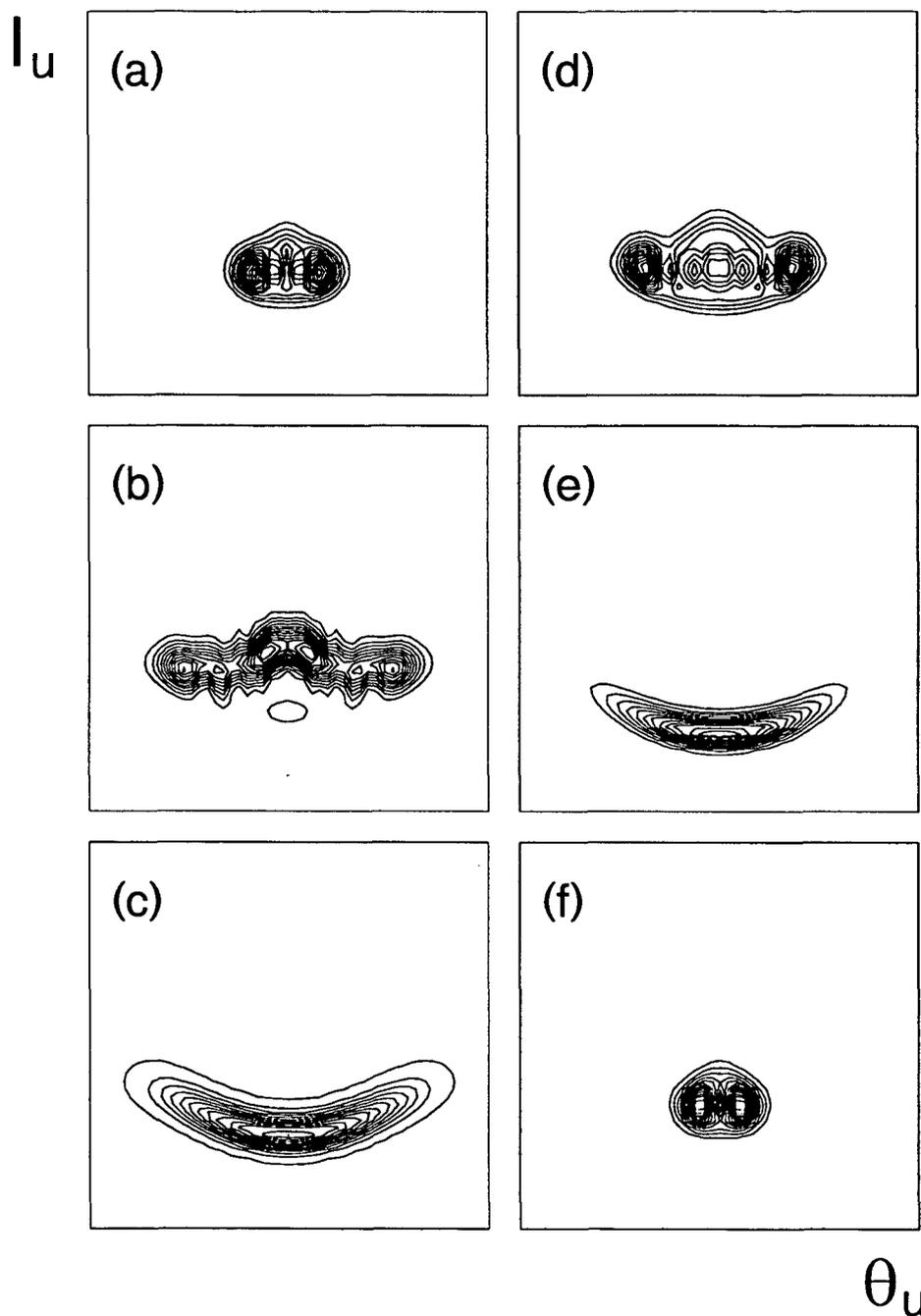


FIG. 5.25 - Représentations de Husimi (densité de probabilité dans l'espace des phases) des résonances ayant une largeur $|\text{Im}\epsilon| \leq 1.4 \times 10^{-10}$, ordonnées suivant leurs durées de vie décroissantes. Les échelles sont les mêmes que celles employées à la figure 5.21. $F_0 = 0.05$, $\omega/2\pi = 36.02$ GHz. $\text{Im}\epsilon \simeq$ (a) 1.2×10^{-14} , (b) 7.1×10^{-14} , (c) 2.0×10^{-13} , (d) 6.2×10^{-13} , (e) 1.0×10^{-12} , (f) 2.6×10^{-12} .

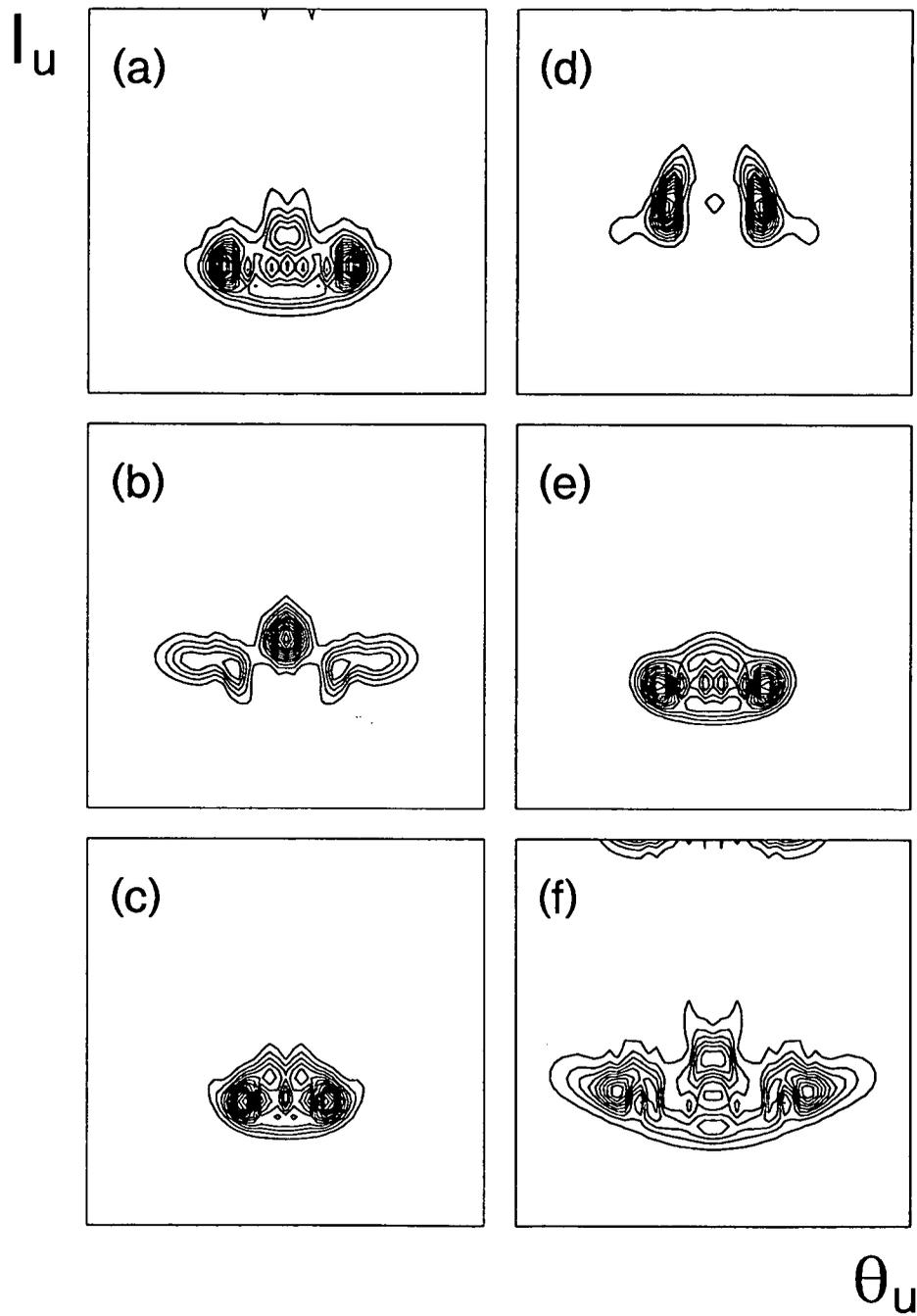


FIG. 5.26 - Suite de la figure 5.23, pour les même valeurs de F_0 et $\omega/2\pi$. $|\text{Im}\epsilon| \simeq$ (a) 5.4×10^{-12} , (b) 1.2×10^{-11} , (c) 1.6×10^{-11} , (d) 2.9×10^{-11} , (e) 4.7×10^{-11} , (f) 7.9×10^{-11} .

vent pendant le temps d'interaction expérimental:

1. Les distributions correspondant aux courbes invariantes de faible valeur de I_u dans la section de Poincaré.

Elles représentent des états liés de l'hydrogène faiblement perturbé avec des valeurs du nombre quantique principal d'environ $n_0 \simeq 20 \dots 40$, ce qui correspond à une valeur effective de $F_0 \simeq 10^{-2}$ dans les figures 5.22 (b),(f), 5.23 (b), 5.25 (c) et (e).

Pour ces états, le champ micro-onde reste perturbatif, leur structure générale n'est pas affectée et le mouvement classique correspondant est régulier. Ils sont les états propres de notre système qui montrent le degré de localisation le plus prononcé le long de l'action [33]. Ils ont un recouvrement négligeable avec l'état initial $|n_0 = 62\rangle$ et ne peuvent ainsi, suite à (4.61), pas contribuer à l'ionisation de l'atome.

2. Les distributions localisées dans les régions stables de l'espace des phases. Nous comprenons par "stable" soit les îlots elliptiques associées à la résonance un ou deux, soit les chaînes d'îlots de Birkhoff qui les entourent, telles qu'elles apparaissent au voisinage de la résonance un dans la figure 5.21 (c) et (d).

Pour $F_0 = 0.035$, les états avec un recouvrement important avec la résonance principale sont ceux représentés sur la figure 5.22 (a), (c), (e). La distribution de la figure 5.24 (f) est localisée à l'intérieur de la chaîne de Birkhoff aux alentours de la résonance principale, qui peut être distinguée sur la figure 5.21 (c). L'état montré à la figure 5.23 (a) reconstitue très exactement dans la densité quantique la résonance deux de l'espace des phases classique.

Pour l'amplitude plus élevée $F_0 = 0.05$, les états quantiques correspondant à la résonance principale sont ceux de la figure 5.25 (a) et (f). Les états montrés sur la figure 5.26 (c) et (e) sont localisés juste au dehors de la résonance centrale, probablement à associer avec la chaîne d'îlots de Birkhoff qui l'entoure et qui n'est que très faiblement visible dans la figure 5.21 (d).

Remarquons qu'une comparaison de la figure 5.26 (c) à la distribution de la figure 5.22 (e), ainsi que de la figure 5.26 (e) à la distribution de la figure 5.24 (f) montre que les densités de probabilité quantiques se ressemblent beaucoup, bien qu'elles soient associées à des structures classiques pas tout-à-fait identiques. Cela nous semble une justification pour notre attribution d'une distribution de Husimi localisée auprès d'une chaîne d'îlots de Birkhoff à *une structure stable*, bien qu'il y ait, le long d'une telle chaîne, une suite alternée de points elliptiques (aux centres des îlots) et hyperboliques (entre deux îlots, cf. 1, 3.3), non résolus par la densité quantique (à cause de la valeur finie de \hbar).

La distribution de la figure 5.26 (d), enfin, correspond à ce qui subsiste de la résonance deux.

3. Les distributions localisées dans la region irrégulière de l'espace des phases classique entourée par les résonances un et deux.

Pour $F_0 = 0.035$, il s'agit des figures 5.22 (d), 5.23 (c) à (f) et des figures 5.24 (b) et (e), dont les maxima des distributions dans les figures 5.22 (d) et 5.23 (c) sont très bien localisés entre la résonance principale et un cantore (cf. 1.1.2, 3.3) au-dessus de celle-ci, ce dernier étant assez difficile à distinguer dans la region stochastique de la figure 5.21 (c). L'état représenté dans la figure 5.23 (f) est lui, au contraire, très exactement localisé au-dessus du même cantore et borné en haut par les deux chaînes d'îlots symétriques correspondant à la résonance deux. Aussi l'état représenté dans la figure 5.24 (e) est très nettement "coincé" entre la résonance principale et la résonance deux, mais il est moins marqué le long du cantore mentionné ci-dessus. Finalement, la distribution de la figure 5.24 (b) a ses maxima allongés le long de la région stochastique.

Remarquons que ce dernier état est en fait difficile à classer dans notre schéma, car son maximum le long du bord bas de la résonance principale pourrait aussi indiquer qu'il faudrait plutôt l'identifier avec la region stable, au moyen de la chaîne d'îlots de Birkhoff autour de la résonance. Cela étant encore une indication que, à cause de la taille finie de \hbar , une stricte distinction des régions stables et instables n'est pas toujours pertinente dans l'image quantique.

Pour $F_0 = 0.05$, nous trouvons les représentants de cette classe dans les figures 5.25 (b) et (d), ainsi que dans les figures 5.26 (a), (b) et (f). La première ressemble beaucoup à la densité de la figure 5.22 (d), bien que ses maxima soient légèrement décalés vers le haut par rapport à la position du cantore observé dans la figure 5.21 (c).

La quatrième ressemble beaucoup à un état cohérent pur, placé dans la region stochastique [144, 145] au centre du triangle défini par la résonance un et par les regions stables correspondant à la résonance deux. Remarquons quand-même que cet état "cohérent" est significativement pollué [144, 145] par les deux maxima secondaires localisés des deux côtés de la résonance principale. Nous verrons un autre exemple d'un tel état "cohérent" localisé dans la "mer stochastique" dans le paragraphe suivant.

Le dernier état dans cette série est localisé dans la même region que le premier, tandis que le deuxième et le troisième ont leurs maxima dans la region stochastique du côté de la résonance principale. Nous sommes en fait plus tentés de les attribuer aux regions stables, à cause de leurs allures globalement très proches de celles des densités représentées sur les figures 5.25 (a), (f) et 5.26 (c), ceci étant pourtant pas compatible avec la comparaison immédiate à la section de Poincaré dans la figure 5.21 (d). Cela indique qu'une telle comparaison directe d'un état de Floquet à une valeur précise de F_0 , sans regard pour son "histoire"

(son évolution adiabatique suivant l'amplitude montante du champ) [54], et notamment son identification avec une région elliptique ou hyperbolique de (ou même une orbite périodique instable dans) l'espace des phases classique devient facilement problématique dans un système avec un espace des phases mixte (cf. 1.1.2, 3.3), en opposition avec les systèmes globalement chaotiques.

4. La dernière classe que nous observons est celle des distributions de Husimi essentiellement délocalisées dans la région irrégulière de l'espace des phases, au-dessus de la résonance principale.

Ce sont les états représentés à la figure 5.24 (a), (c) et (d), pour $F_0 = 0.035$. Ces états ne semblent plus associables ni à la résonance un, ni à la résonance deux. Pourtant, comme on le déduit de la légende de la figure, ils ont une durée de vie plus longue que des états associés aux résonances d'ordre plus bas ! Ils fournissent ainsi des exemples que même des états délocalisés peuvent survivre pendant le temps d'interaction expérimental [33], par plus d'un ordre de grandeur, dans le modèle unidimensionnel de l'atome. Cette remarque ne perd rien de sa pertinence par le fait que le recouvrement de ces états avec l'état initial $|n_0 = 62\rangle$ est négligeable, car il ne l'est pas pour un autre choix de n_0 .

De plus, une identification de tels états avec des orbites périodiques individuelles n'est plus possible et ils ne peuvent ainsi pas être cités comme exemples d'un effet stabilisant des cicatrices. Ils doivent plutôt être considérés comme représentants d'une stabilisation due à l'interférence aléatoire des amplitudes de probabilité quantiques le long des différents canaux de transition au continuum. Une telle image est assez voisine d'un effet comparable observé dans le cas d'un atome d'hydrogène dans un champ magnétique intense [146] et devrait donc en principe être vérifiable par une analyse statistique de la distribution des largeurs des états de Floquet, dans l'esprit des matrices aléatoires [19]. Elle est d'ailleurs très proche de l'image de fond de la théorie de la localisation dynamique (cf. 1.1.1).

A partir des figures 5.22 à 5.26, on s'aperçoit tout de suite qu'il n'y a *pas* de relation univoque entre le degré de localisation d'une distribution de Husimi dans l'espace des phases classique et sa durée de vie. Bien qu'une corrélation entre les deux propriétés semble bien évidente, ils existent des contre-exemples comme ceux des figures 5.24 (a), (c) et (d), qui sont aussi ou même plus stables que leurs homologues localisés.

Comme nous l'avons déjà mentionné plus tôt (cf. 1.1, 5.6.1), le couplage au continuum ne peut être affecté par la structure de la distribution de Husimi au voisinage de son maximum que par un effet d'ordre secondaire. Celui-ci doit alors se traduire sur le comportement de la densité électronique *loin* du maximum, vu les temps d'interaction expérimentaux typiques, correspondant à quelques

centaines d'orbites de Kepler de l'électron non-perturbé.

Les cicatrices et leur stabilité

Revenons maintenant au problème des cicatrices d'une fonction d'onde. Nous l'avons rencontré déjà maintes fois (cf. 5.4, 5.5, 5.6.1) dans ce chapitre, suite à l'attribution de la "stabilité anormale" de Koch et al.[10, 28] à une telle structure individuelle[42].

Rappelons d'abord que la notion de cicatrice n'est a priori *pas* liée à la durée de vie de l'état quantique qui montre cette propriété. Rappelons de plus, que le concept des cicatrices a été développé pendant l'étude des systèmes globalement chaotiques, et donc pas pour des systèmes avec un espace des phases mixte (cf. 1.1.2).

A part l'interprétation des expériences de Koch et al.[10, 28] par Jensen et al. [36, 42], que nous avons discutée dans les paragraphes précédents, il reste ainsi deux questions *distinctes* pour la compréhension du transport quantique dans l'espace des phases:

1. Est-ce qu'il y a des états de Floquet avec une cicatrice le long d'une orbite périodique instable (et cela pour les paramètres de la "stabilité anormale" de Koch et al.)?
2. Pourquoi de tels états propres sont-ils stables vis-à-vis de l'ionisation par le champ?

Commençons par la réponse à la première question. Comme nous l'avons remarqué au début de cette section, toutes les distributions de Husimi que nous montrons ici sont obtenues aux valeurs des paramètres physiques correspondant à la "stabilité anormale" de Koch et al.. Notamment, la pulsation réduite $\omega_0 = 1.304$ (à $n_0 = 62$ et $\omega/2\pi = 36.02$ GHz) est plus grande que 1. Comme on l'a vu à partir de la section de Poincaré de l'espace des phases classique sur la figure 5.21 (d), l'ionisation de l'état $|n_0 = 62\rangle$ implique l'excitation surtout des états de Floquet localisés dans la région comprise *entre* les résonances un et deux.

Il ne peut alors pas surprendre que l'état de Floquet avec le recouvrement le plus important ayant l'état initial $|n_0 = 62\rangle$ soit celui représenté à la figure 5.22 (d), à $F_0 = 0.035$, et celui sur la figure 5.26 (b), à $F_0 = 0.05$. Les projections des deux états sur l'espace des phases sont simplement localisées au voisinage de la projection correspondante de l'état $|n_0 = 62\rangle$ non perturbé. Leurs recouvrements avec $|n_0 = 62\rangle$ valent 12.3% (fig. 5.22 (d)) et 17.8% (fig. 5.26 (b)), respectivement. A $F_0 = 0.035$, il y a un autre état avec un recouvrement comparable de 10.1%, celui représenté sur la figure 5.23 (c).

L'état dominant la dynamique à $F_0 = 0.05$ est exactement l'état "cohérent" placé dans la région stochastique dont nous parlions dans le paragraphe précédent, et il fait partie de la catégorie 3 de notre classification des états propres. Il est donc déjà un bon candidat pour une cicatrice, sans que nous puissions isoler l'orbite périodique le long de laquelle il est localisé.

Cela est au contraire simple pour l'état dominant la dynamique à $F_0 = 0.035$: Un changement de la phase externe de $\omega_0 t_0 = 0$ (notre choix pour toutes les distributions de Husimi montrées jusqu'ici) à $\omega_0 t_0 = \pi$ permet une identification très nette avec le point hyperbolique principal complémentaire à la résonance un. La figure 5.27 compare ces deux situations. La comparaison entre la figure 5.27 (a) et (b), à $\omega_0 t_0 = 0$, ne permet que de constater une localisation de l'état de Floquet proche de la position de la projection de l'état $|62\rangle$ non-perturbé et un alignement des maxima de la quasiprobabilité le long et en-dessous du cantore mentionné plus tôt (cf. la catégorie 3). La même comparaison à une phase de la perturbation décalée de π montre une distribution de Husimi qui consiste essentiellement en un état cohérent localisé à la position de la résonance principale à une phase π plus tôt, et donc juste à la position du point hyperbolique principal. Par conséquent, l'état de Floquet considéré ici décrit un état propre localisé le long d'une orbite périodique (avec la même période que le champ externe) instable et représente, en effet, un bel exemple pour une cicatrice d'une fonction d'onde. La pollution de l'état "cohérent" à phase π du champ correspond très probablement au flot classique le long des directions stable et instable au voisinage du point hyperbolique. Notons que cette pollution est une contribution indispensable pour garantir la périodicité de la dynamique de la probabilité associée. La probabilité qui est nécessairement perdue le long de la variété instable du point fixe hyperbolique *doit* être réalimentée par la variété stable.

La première de nos deux questions a ainsi trouvé une réponse affirmative: il y a des états de Floquet avec une cicatrice [36, 42]. A une phase du champ précise, ces états ressemblent beaucoup à un état cohérent qui est localisé sur un point hyperbolique de la section de Poincaré [144, 145].

Les deux états représentés sur les figures 5.22 (d) et 5.26 (b) ont de plus des parties imaginaires de leurs valeurs propres assez petites ($\text{Im}\epsilon \simeq -3.7 \times 10^{-13}$ et $\text{Im}\epsilon \simeq -1.2 \times 10^{-11}$) devant la valeur critique (5.5). Cela nous rappelle notre deuxième question: quelle est l'origine de cette stabilité?

Nous avons vu dans le dernier paragraphe que la simple localisation de ces états ne représente pas une propriété suffisante pour leurs durées de vie assez longues. Il nous faut de plus "l'histoire" de ces états, en fonction de l'amplitude du champ qui prend le rôle du "temps historique".

Comme nous l'avons déjà mentionné, l'état dominant la dynamique à $F_0 = 0.035$ montre une localisation apparente le long d'un cantore dans l'espace des phases classique, à phase 0 du champ. Cela suggère une origine semiclassique de la stabilité observée.

Comme il y a en fait plusieurs états de Floquet localisés le long du cantore mentionné, l'analyse de la dynamique des niveaux pour notre cicatrice se révèle très compliquée, à cause d'un nombre important d'anticroisements de largeurs différentes. C'est pourquoi nous présentons d'abord un autre exemple d'un état associé au même cantore, dont nous connaissons bien l'évolution en fonction de l'amplitude F_0 . Il s'agit de l'état représenté sur la figure 5.28 (e), qui fait partie du spectre de Floquet à $F_0 = 0.05$. Bien que les maxima principaux de sa distribution

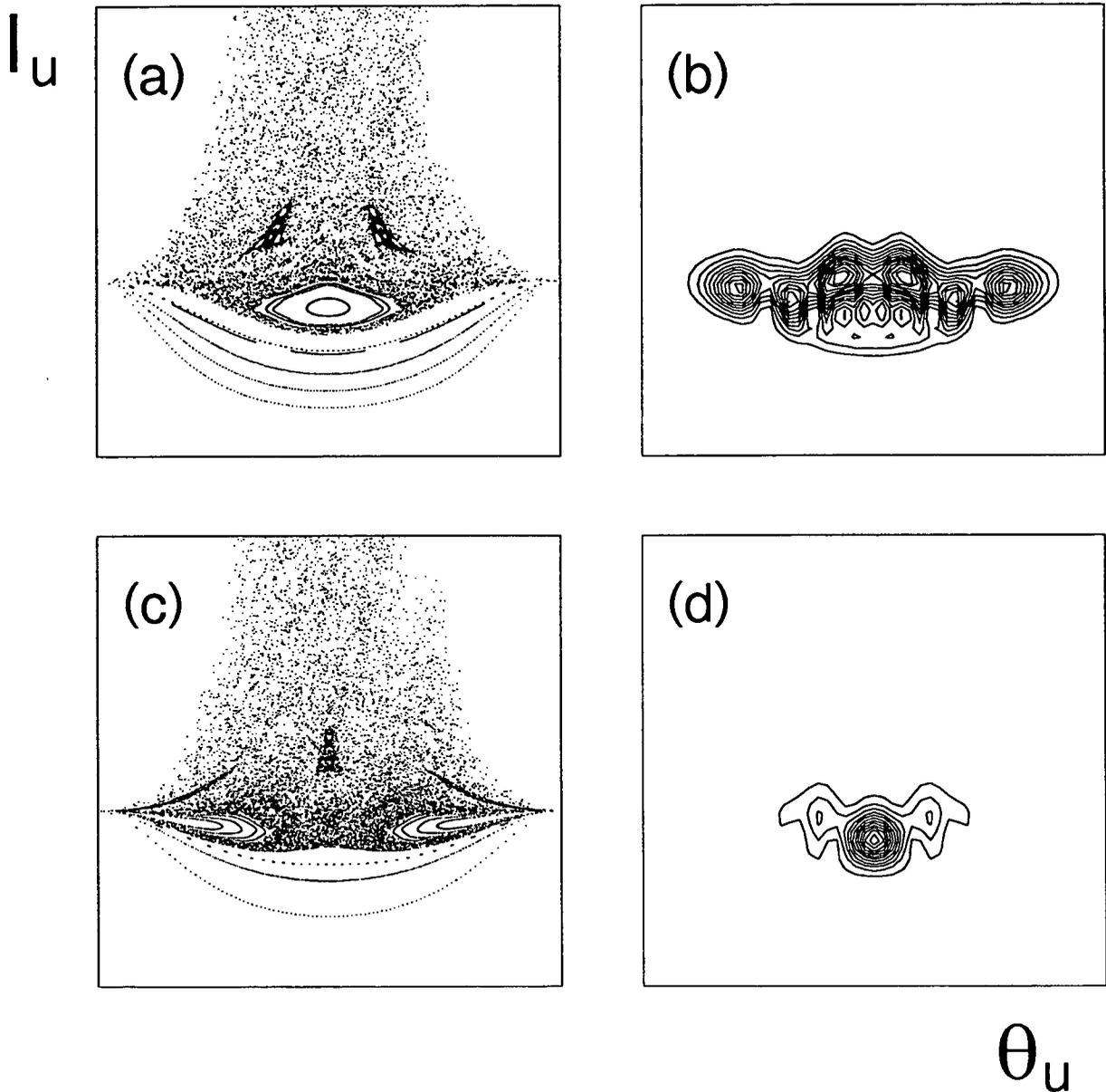


FIG. 5.27 - Distribution de Husimi de l'état de Floquet avec le recouvrement le plus important (12.3%) avec l'état initial $|n_0 = 62\rangle$ parmi les états de longue durée de vie représentés dans les figures 5.22 à 5.24 ($F_0 = 0.035$), pour deux valeurs différentes de la phase de la perturbation, en comparaison avec les sections de Poincaré associées. (a) et (b): Section de Poincaré et densité quantique à $\omega_0 t_0 = 0$. (c) et (d): $\omega_0 t_0 = \pi$.

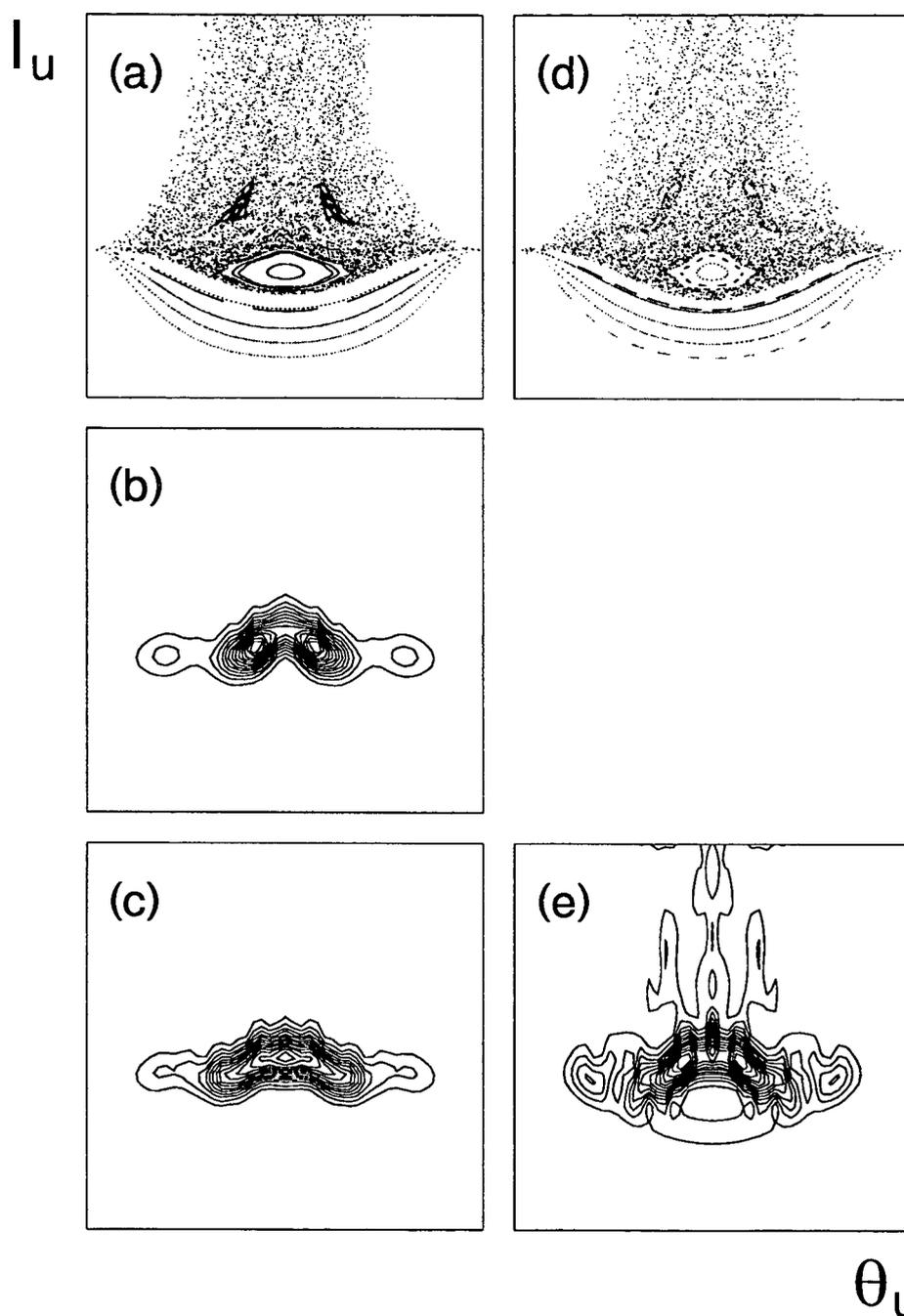


FIG. 5.28 - Un exemple du prolongement diabatique d'un état de Floquet en fonction de F_0 , en comparaison avec les sections de Poincaré de l'espace des phases classique aux deux valeurs de (a) $F_0 = 0.035$ et (d) $F_0 = 0.05$ (pour $\omega_0 t_0 = 0.0$). (b) et (c): Distributions de Husimi représentant les états de Floquet à $F_0 = 0.035$ avec $\text{Re}\epsilon \simeq -1.294 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -2.2 \times 10^{-11}$ (b) et $\text{Re}\epsilon \simeq -1.314 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -9.0 \times 10^{-12}$ (c), et un recouvrement de 2.2% (b) et 4.7% (c) avec l'état initial $|n_0 = 62\rangle$. La distribution montrée dans (e) représente la continuation diabatique de l'état montré en (c), à $F_0 = 0.05$. L'état de quasiénergie $\text{Re}\epsilon \simeq -1.296 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -2.5 \times 10^{-10}$ a un recouvrement de 5.9% avec l'état $|n_0 = 62\rangle$.

de Husimi soient situés presque exactement à la position de ceux de la distribution (b), à valeur plus basse du champ, il représente en fait le prolongement adiabatique à travers plusieurs anticroisements de l'état représenté en (c) que nous avons déjà rencontré dans la figure 5.23 (f). La distribution (e) est ainsi légèrement décalée vers des valeurs de I_u plus hautes, par rapport à celle de (c).

De plus, le prolongement adiabatique à $F_0 = 0.05$ suggère une fuite de la probabilité quantique plus importante vers le continuum, par rapport à l'état associé par la dynamique des niveaux à $F_0 = 0.035$. Cela pourrait être interprété dans une image semiclassique comme conséquence de la dissolution progressive du cantore avec des valeurs croissantes de F_0 , tandis que la chaîne d'îlots associée à la résonance deux semble conserver encore son effet ralentissant sur le transport quantique.

Quant à notre cicatrice de la figure 5.27 nous constatons la chose suivante : au voisinage de $F_0 \simeq 0.041$ cet état subit un anticroisement avec l'état de la figure 5.28 (c), dont nous venons de connaître le prolongement adiabatique à $F_0 = 0.05$. Le prolongement adiabatique de la cicatrice ($\text{Re}\epsilon \simeq -1.2929 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -3.7 \times 10^{-14}$) est représentée à la figure 5.26 (f), avec $\text{Re}\epsilon \simeq 1.298 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq 7.9 \times 10^{-11}$ et un recouvrement de 3.5% avec l'état initial $|n_0 = 62\rangle$.

Suite au mélange des différents états par l'anticroisement à $F_0 \simeq 0.041$, nous concluons que la stabilité de la cicatrice de la figure 5.27 est associée au même cantore que la stabilité des états représentés aux figures 5.28 (c) et (e). La cicatrice de la figure 5.26 (b), d'ailleurs, se révèle comme prolongement adiabatique de l'état $|n_0 = 63\rangle$.

En conclusion, nous voyons clairement que l'explication de la stabilité d'un état de Floquet individuel (qu'il s'agisse d'une cicatrice ou non) demande la connaissance de la dynamique des niveaux d'énergie associés. *Seule la comparaison d'un état de Floquet et de sa distribution de Husimi à la continuation adiabatique ou adiabatique du même état permet de prévoir l'évolution de sa décroissance vers le continuum.*

Dynamique temporelle des états de Floquet

Pour conclure ce chapitre, nous allons étudier la dynamique temporelle des états de Floquet. Nous nous contentons de quelques représentants des quatre classes d'états typiques que nous avons distingués (cf. l'avant-dernier paragraphe du présent chapitre) sur les figures 5.22 à 5.24 (pour $F_0 = 0.035$). Chaque état de Floquet sera représenté aussi bien dans l'espace des phases que dans l'espace de configuration.

Commençons par un représentant de la première classe, un état de faible valeur du nombre quantique principal, $n_0 \simeq 47$ (voir aussi la fig. 5.22 (b)). Pour cet état, l'amplitude réduite prend une valeur effective (3.19) de $F_0 \simeq 0.012$ et le champ extérieure n'est donc qu'une faible perturbation. Par conséquent, les figures 5.29 et 5.30 ne montrent qu'un mouvement très faible de l'état lié $|n_0 = 47\rangle$ avec la perturbation externe. La structure de la fonction d'onde n'est pratiquement

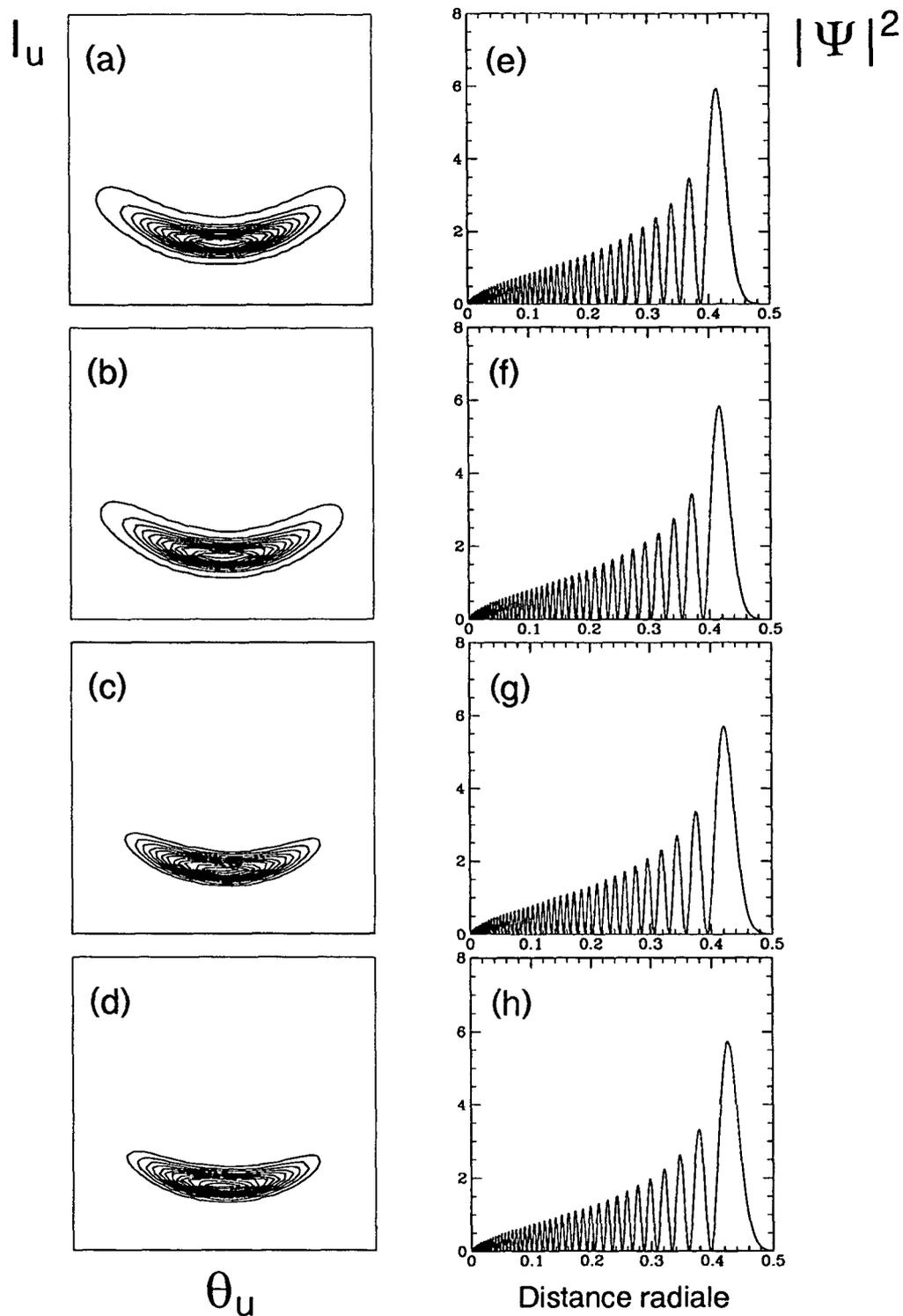


FIG. 5.29 - Évolution temporelle de l'état de Floquet représenté à la figure 5.22 (b), dans la représentation de Husimi (première colonne) ainsi que de configuration (deuxième colonne). Échelles pour la distribution de Husimi comme sur les figures précédentes. Pour la représentation de configuration la distance radiale est mesurée en 10^4 a.u., le carré du module en unités arbitraires. Phase du champ $\omega_0 t_0 =$ (a), (e): 0; (b), (f): $\frac{\pi}{4}$; (c), (g): $\frac{\pi}{2}$; (d), (h): $\frac{3\pi}{4}$.

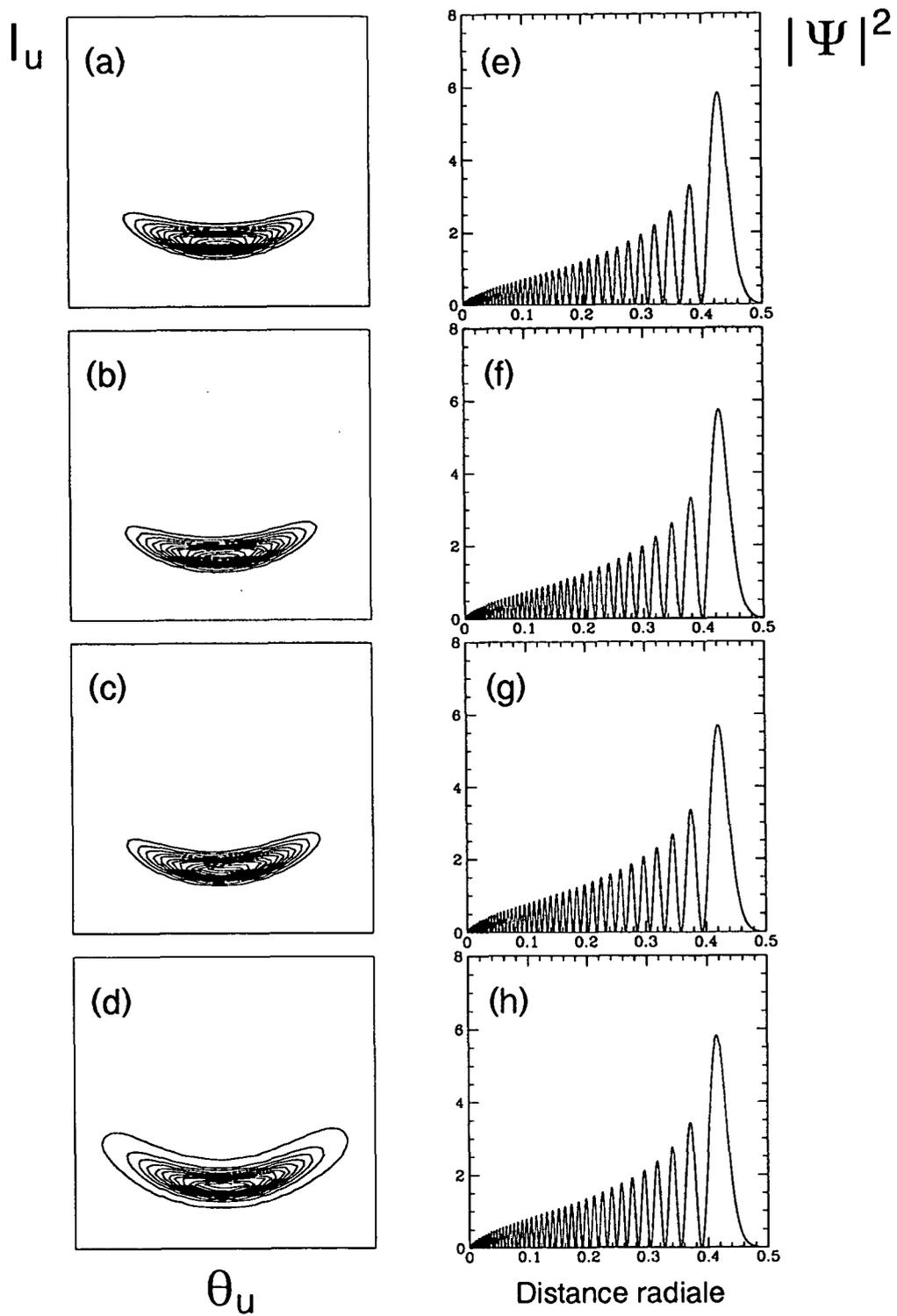


FIG. 5.30 - Suite de la figure 5.29. Phase du champ $\omega_0 t_0 =$ (a), (e): π ; (b), (f): $\frac{5\pi}{4}$; (c), (g): $\frac{3\pi}{2}$; (d), (h): $\frac{7\pi}{4}$.

pas affectée par le champ extérieur, à part d'une oscillation de petite amplitude autour de la position à phase 0 qui montre une excursion maximale d'environ 70 a.u. (pour une taille totale de ca. $2n_0^2 = 4418$ a.u.).

Les figures 5.31 et 5.32 montrent l'évolution de l'état de Floquet représenté à la figure 5.22 (a), qui suit la résonance classique principale et dont le couplage au continuum est parfaitement négligeable. Il s'agit donc d'un représentant de la deuxième classe d'états propres introduite ci-dessus.

De plus, il s'agit d'un objet d'un intérêt indépendant du "chaos quantique", car cet état représente un paquet d'onde pratiquement *nondispersif* qui suit la dynamique classique de l'électron atomique, dans ce modèle unidimensionnel. Si l'on peut montrer qu'un tel paquet d'onde localisé sur la résonance principale existe aussi pour l'atome tridimensionnel réel (cf. 6.2.4), on aurait un objet quantique obéissant aux équations du mouvement classique qui ne montre *pas de dispersion*. Dans *toutes* les expériences jusqu'ici effectuées sur les paquets d'onde se propageant le long d'une orbite classique [84, 85, 147, 148]: le signal disparaît à cause la dispersion de l'objet quantique après un petit nombre de périodes classiques. Ici cette dispersion, due à la nonlinéarité du potentiel Coulombien, est vaincue par l'accrochage de la dynamique Coulombienne sur la micro-onde extérieure.

Quant à la représentation de configuration, notons la dispersion du paquet d'onde quand il s'approche du noyau. Dans l'espace des phases, cette dispersion se manifeste comme un paquet d'onde rentrant dans et un autre sortant de la singularité Coulombienne.

Un deuxième représentant de la classe deux est montré aux figures 5.33 et 5.34. Elles montrent la dynamique de l'état propre de la figure 5.23 (a), correspondant à la résonance deux dans l'espace des phases classique. On s'aperçoit très bien de l'interférence des deux paquets d'onde associés dans la représentation de configuration, ainsi que de la dispersion au noyau à la phase π .

Un troisième représentant des états de Floquet associés à une région stable de l'espace des phases mixte suit sur les figures 5.35 et 5.36. Nous représentons la dynamique de l'état de Floquet localisé sur la résonance principale qui a la plus grande extension en Θ_u et le plus grand nombre de noeuds le long de la même coordonnée. La comparaison avec les deux exemples précédents montre qu'il s'agit ici de l'interférence de deux états cohérents localisés sur la même structure classique.

Les figures 5.37 et 5.38 montrent un cycle complet de la dynamique de l'état de Floquet associé au point hyperbolique principal (cf. la figure 5.27) et donc d'un représentant de la troisième catégorie d'états propres. La représentation de configuration à la phase π (cf. fig. 5.38 (e)) de la perturbation montre bien qu'il ne s'agit pas d'un état cohérent pur dans la distribution de Husimi correspondante (à comparer à la figure 5.31 (a)). Pourtant, à cette phase, nous observons la structure la plus régulière dans l'espace de configuration, tandis que pour les phases différentes aussi bien la projection sur l'espace des phases que la densité sur la coordonnée spatiale prennent une allure déjà relativement compliquée.

Les figures 5.39 et 5.40 enfin montrent la dynamique d'un état délocalisé dans

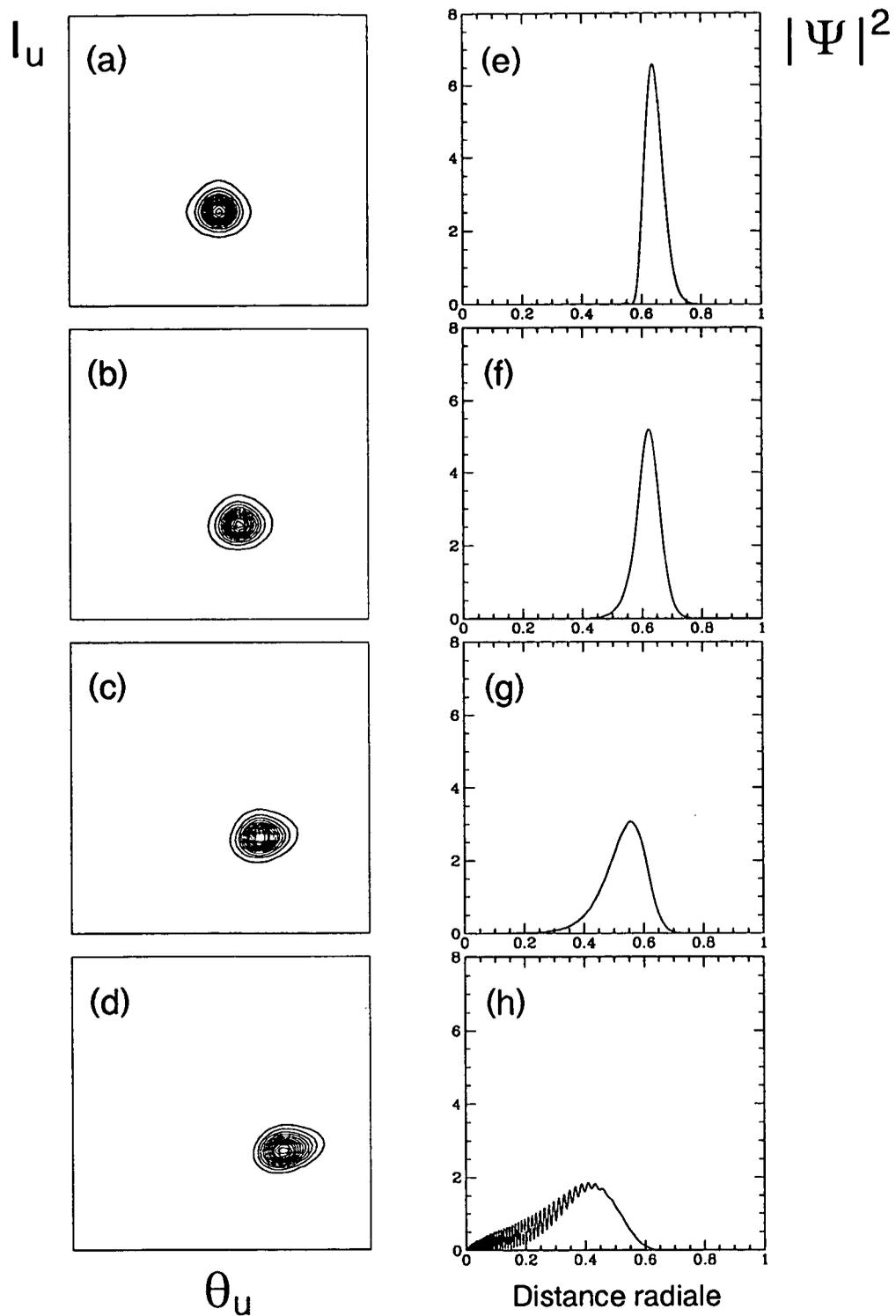


FIG. 5.31 - Évolution temporelle de l'état de Floquet représenté à la figure 5.22 (a), dans la représentation de Husimi (première colonne) ainsi que de configuration (deuxième colonne). Échelles comme sur les figures précédentes. Phase du champ $\omega_0 t_0 =$ (a), (e): 0; (b), (f): $\frac{\pi}{4}$; (c), (g): $\frac{\pi}{2}$; (d), (h): $\frac{3\pi}{4}$.

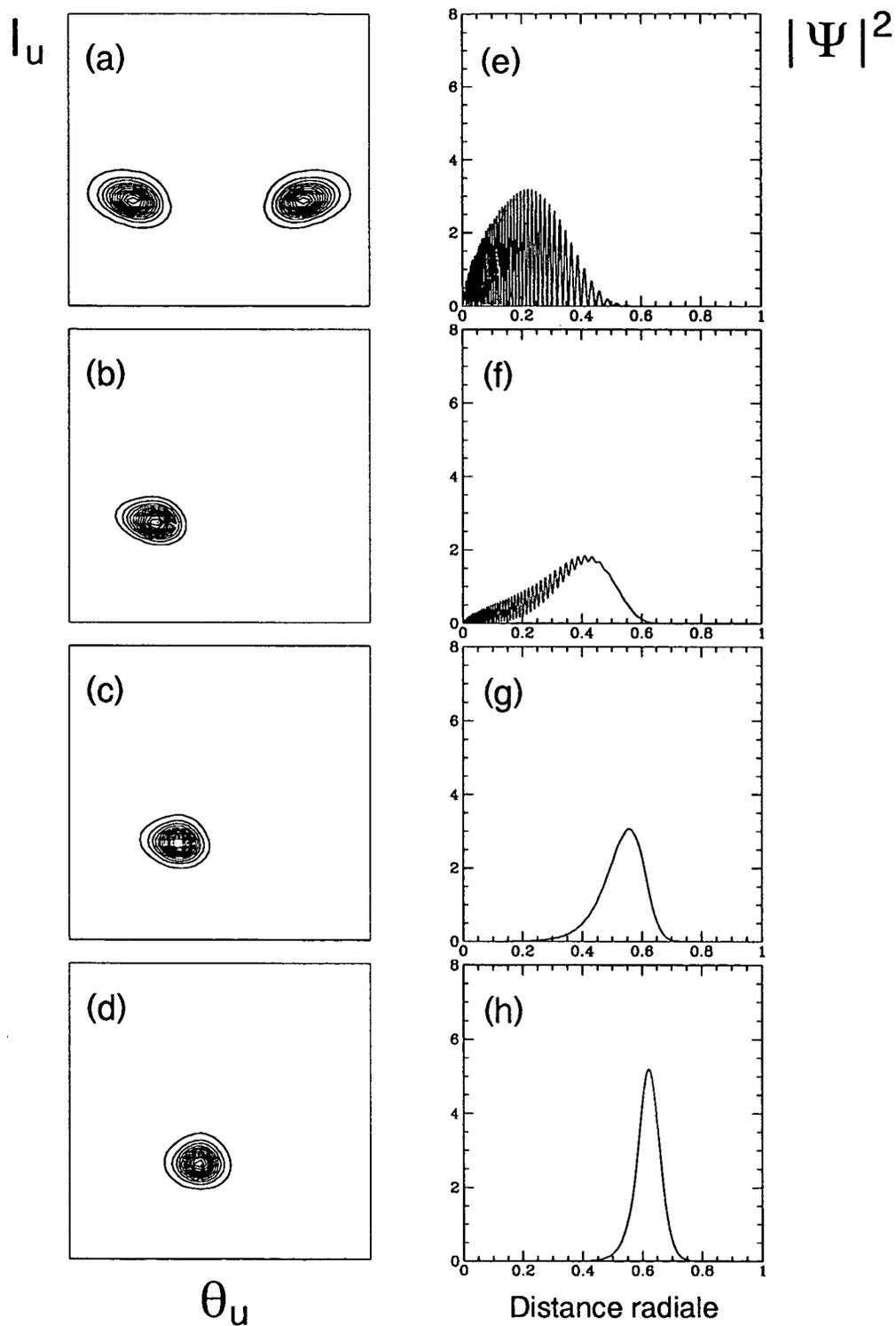


FIG. 5.32 - Suite de la figure 5.31. Phase du champ $\omega_0 t_0 =$ (a), (e): π ; (b), (f): $\frac{5\pi}{4}$; (c), (g): $\frac{3\pi}{2}$; (d), (h): $\frac{7\pi}{4}$.

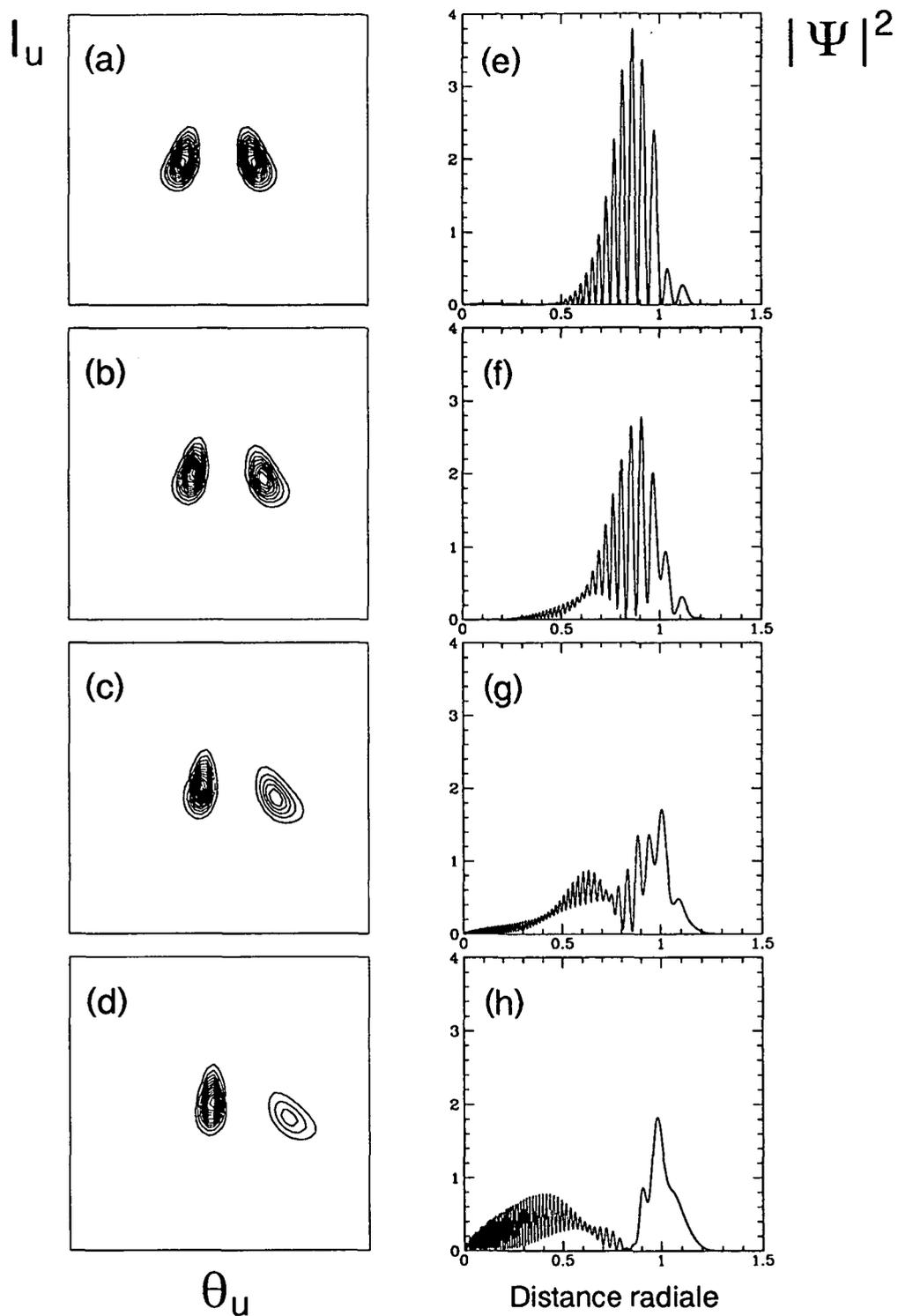


FIG. 5.33 - Évolution temporelle de l'état de Floquet représenté à la figure 5.23 (a), dans la représentation de Husimi (première colonne) ainsi que de configuration (deuxième colonne). Échelles comme sur les figures précédentes. Phase du champ $\omega_0 t_0 =$ (a), (e): 0; (b), (f): $\frac{\pi}{4}$; (c), (g): $\frac{\pi}{2}$; (d), (h): $\frac{3\pi}{4}$.

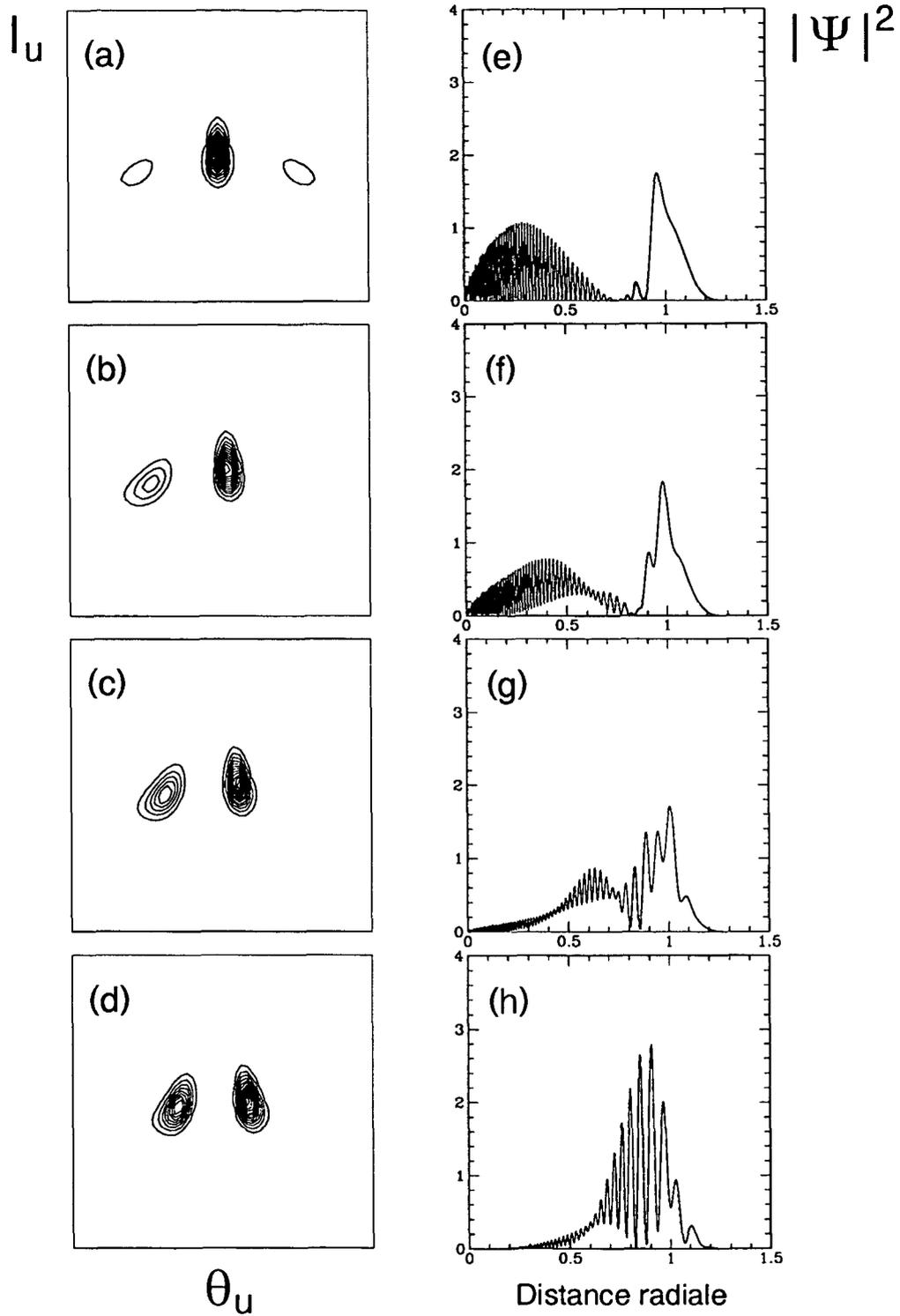


FIG. 5.34 - Suite de la figure 5.33. Phase du champ $\omega_0 t_0 =$ (a), (e): π ; (b), (f): $\frac{5\pi}{4}$; (c), (g): $\frac{3\pi}{2}$; (d), (h): $\frac{7\pi}{4}$.

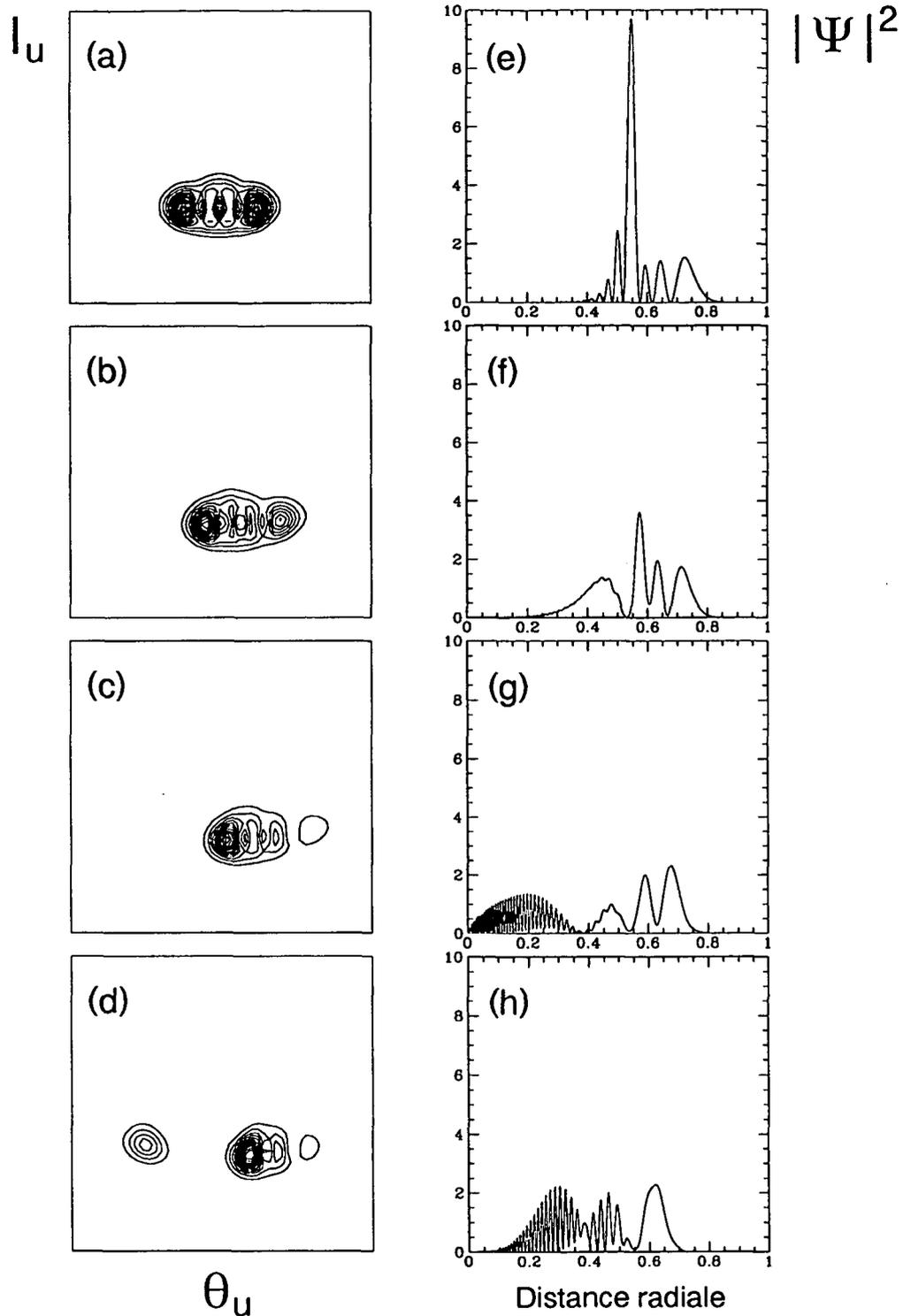


FIG. 5.35 - Évolution temporelle de l'état de Floquet représenté à la figure 5.22 (e), dans la représentation de Husimi (première colonne) ainsi que de configuration (deuxième colonne). Échelles comme sur les figures précédentes. Phase du champ $\omega_0 t_0 =$ (a), (e): 0; (b), (f): $\frac{\pi}{4}$; (c), (g): $\frac{\pi}{2}$; (d), (h): $\frac{3\pi}{4}$.

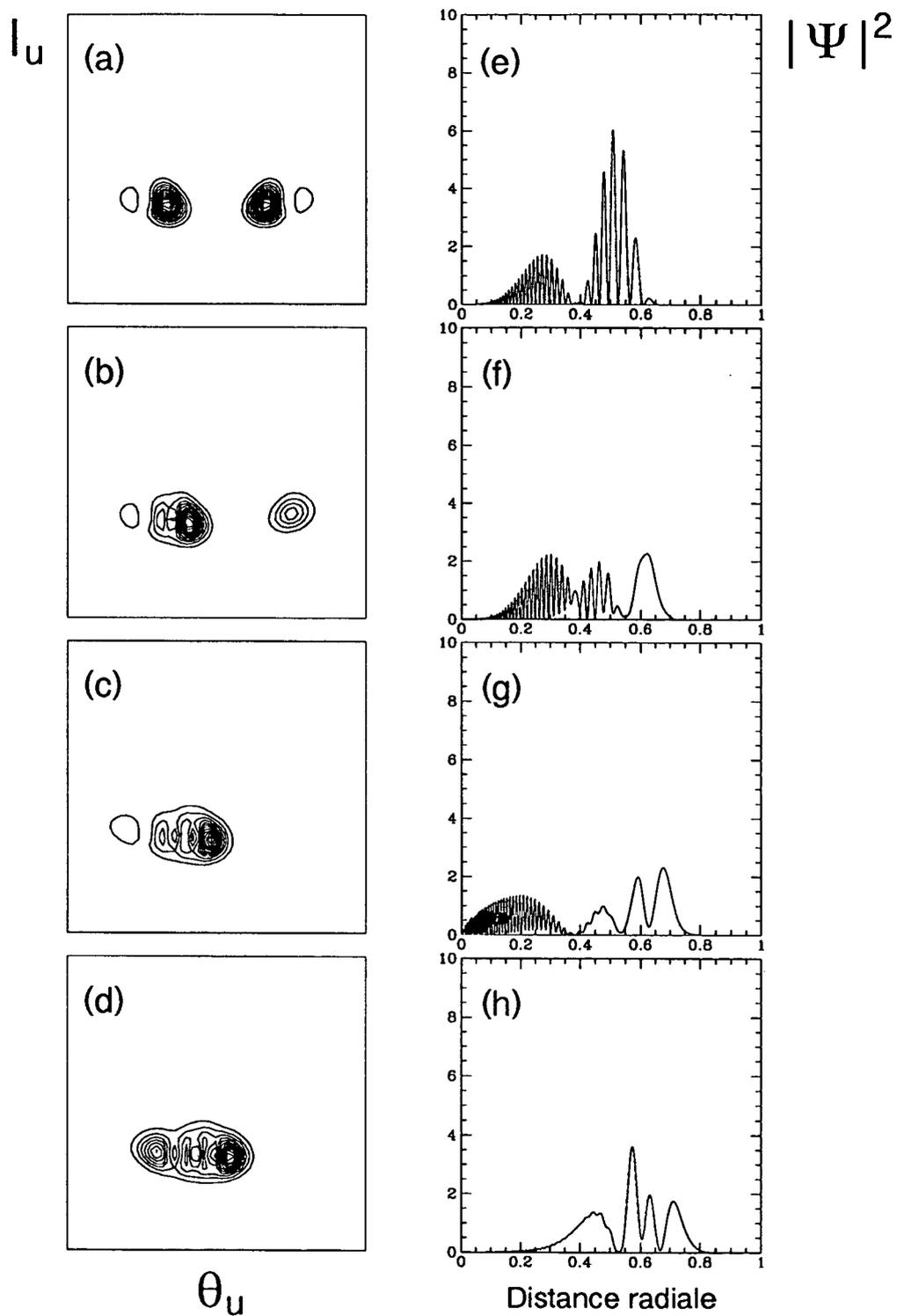


FIG. 5.36 - Suite de la figure 5.35. Phase du champ $\omega_0 t_0 =$ (a), (e): π ; (b), (f): $\frac{5\pi}{4}$; (c), (g): $\frac{3\pi}{2}$; (d), (h): $\frac{7\pi}{4}$.

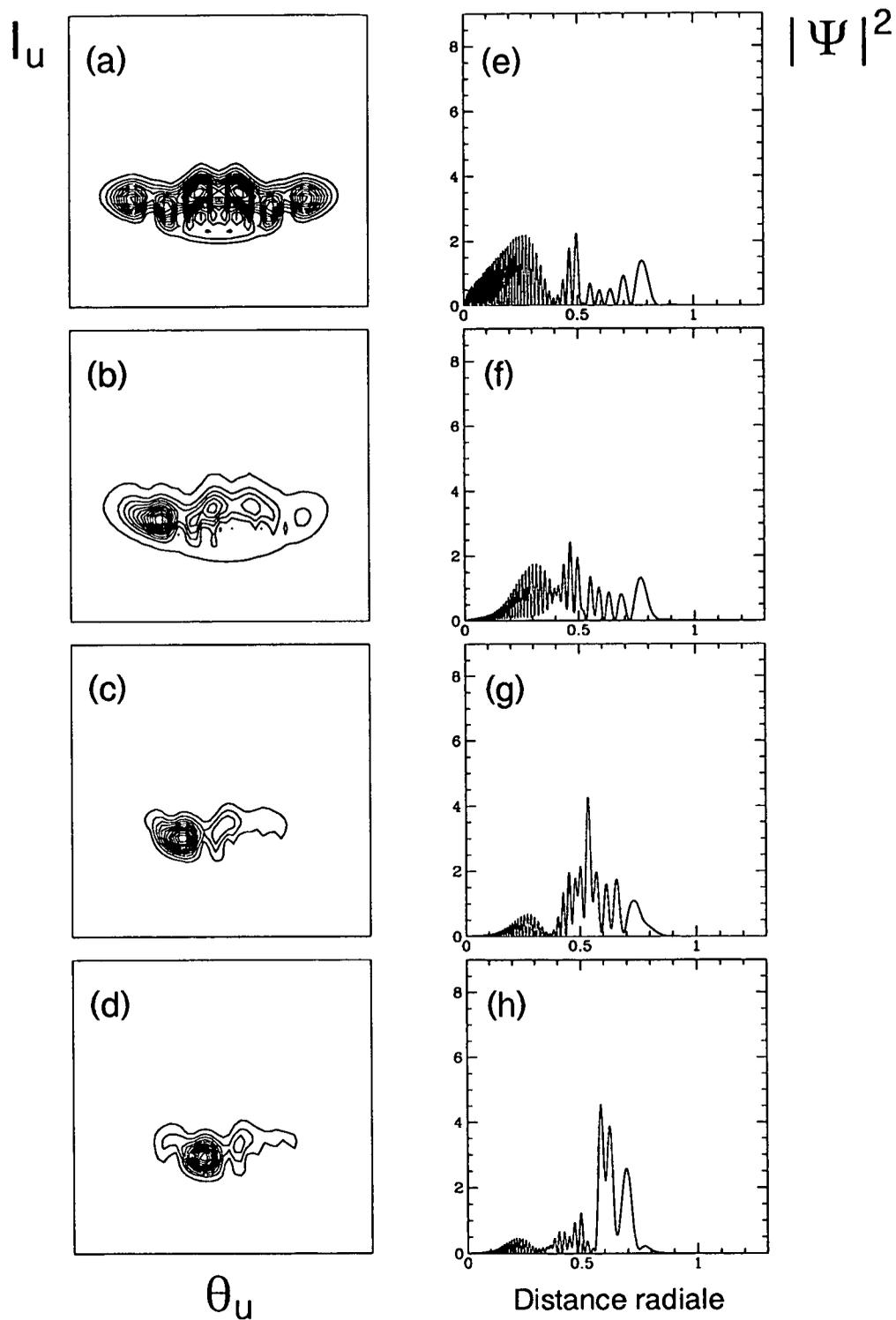


FIG. 5.37 - Évolution temporelle de l'état de Floquet représenté à la figure 5.22 (d), dans la représentation de Husimi (première colonne) ainsi que de configuration (deuxième colonne). Échelles comme aux figures précédentes. Phase du champ $\omega_0 t_0 =$ (a), (e): 0; (b), (f): $\frac{\pi}{4}$; (c), (g): $\frac{\pi}{2}$; (d), (h): $\frac{3\pi}{4}$.

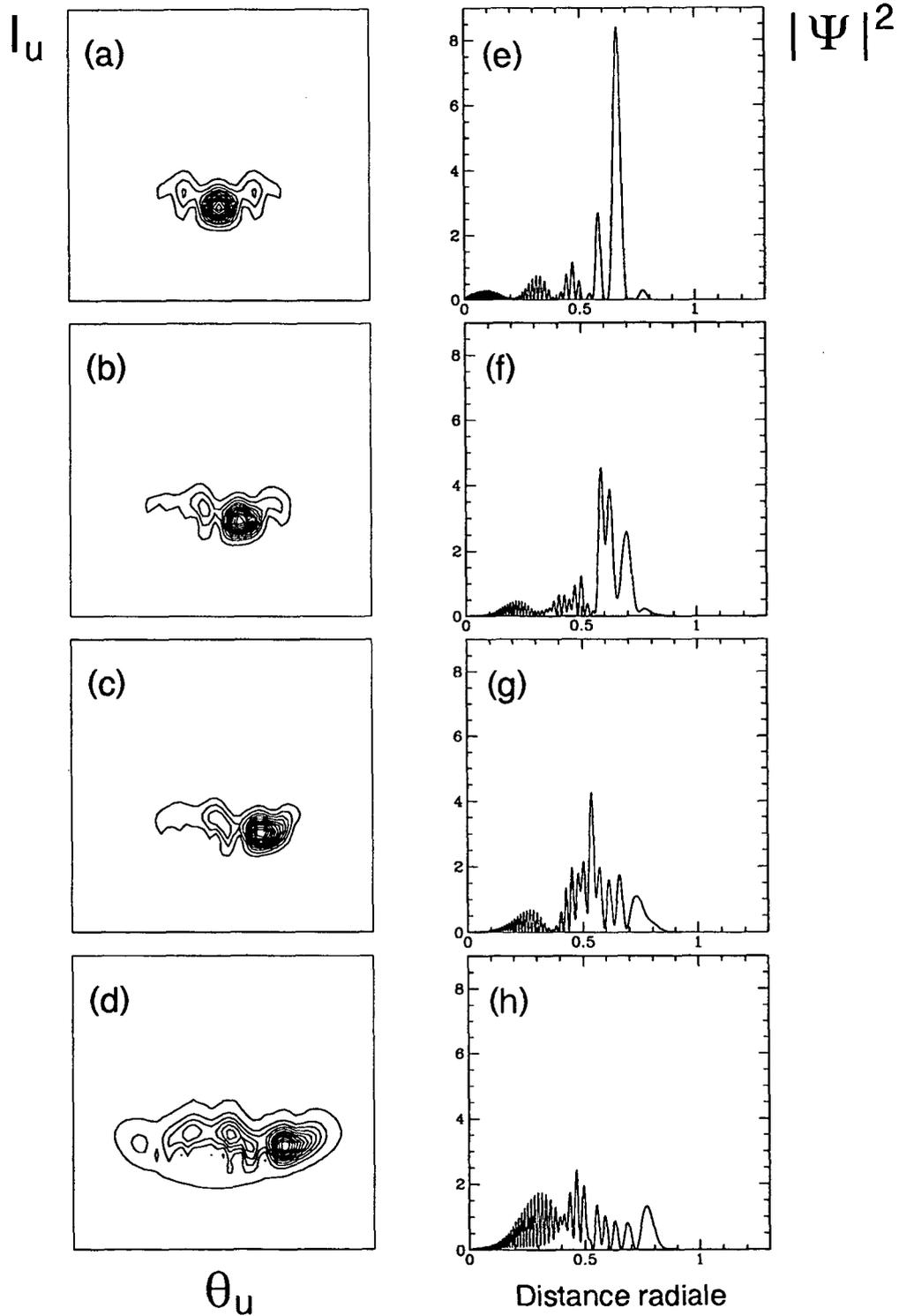


FIG. 5.38 - Suite de la figure 5.37. Phase du champ $\omega_0 t_0 =$ (a), (e): π ; (b), (f): $\frac{5\pi}{4}$; (c), (g): $\frac{3\pi}{2}$; (d), (h): $\frac{7\pi}{4}$.

l'espace des phases (voir figure 5.24 (d); catégorie quatre dans notre classification). Déjà, dans la dynamique de la quasiprobabilité, nous ne pouvons plus distinguer une évolution systématique de paquets d'onde individuels, ce qui était le cas dans tous les exemples précédents, mêmes dans le cas de la cicatrice le long de l'orbite périodique instable principale (figures 5.37 et 5.38). Cela correspond à une évolution entièrement irrégulière dans l'espace de configuration, telle qu'elle s'était déjà annoncée dans l'exemple précédent. Remarquons que des fonctions d'onde comme nous les observons ici ont été observées tout au début de l'étude du "chaos quantique" [149, 150] et qu'elles avaient été baptisées "fonctions d'onde chaotiques" ("chaotic wavefunctions"), par conséquence immédiate de leur allure.

Comme nous l'avons remarqué dans le chapitre 4.4, il est aussi possible de générer la dynamique temporelle d'un état initial quelconque $|\Phi_0\rangle$, en utilisant les équations (4.66), (4.67), et (4.70). Pourtant, au moins pour le cas des états initiaux avec $n_0 = 61, \dots, 63$, on n'observe pas d'effets d'interférences importants entre les différents états de Floquet et on n'en obtient pas des informations qui aillent au-delà des conclusions obtenues à partir d'une étude de la dynamique des niveaux ou des états de Floquet individuels comme nous l'avons présentée ci-dessus. Pour cette raison, nous renonçons ici à une telle présentation.

5.7.3 Conclusion

Notre étude de l'ionisation de l'atome unidimensionnel par un champ micro-onde se termine ici.

Nous avons discuté dans ce chapitre quelques caractéristiques principales du processus d'ionisation que nous retrouverons aussi dans la situation réelle d'un atome tridimensionnel, telles que la dépendance temporelle du signal d'ionisation et son comportement en fonction de l'amplitude du champ.

Nous avons vu que la mécanique quantique obéit globalement bien aux lois d'échelle classiques (3.19), sur un intervalle assez important du nombre quantique principal ($n_0 \simeq 23, \dots, 62$), et que l'inclusion du continuum dans la simulation numérique conforte les hypothèses de base de la théorie de la localisation dynamique [7]. Nous avons aussi remarqué qu'en dépit des lois d'échelle classiques, une augmentation de n_0 implique une décroissance globale du seuil d'ionisation. Celle-ci est plus notable pour les fréquences élevées, sans trop affaiblir l'effet de la localisation dynamique.

Nous avons remarqué que notre approche d'une projection adiabatique de la fonction d'onde sur la base de Floquet fournit un très bon accord avec divers résultats expérimentaux [8, 10, 28, 135]. Ceci notamment pour les valeurs de la pulsation réduite au-dessus de $\omega_0 \simeq 1.5 \dots 1.7$ et, en moyenne, aussi pour les valeurs plus petites. Pour une simulation avec $n_0 = 23$ fixe et une pulsation ω variable, on a toujours un accord qualitatif avec les expériences effectuées pour des valeurs de n_0 au voisinage de 60.

Nous avons énoncé quelques propriétés locales de la dynamique spectrale de ce modèle unidimensionnel et en avons illustré les conséquences pour les grandeurs

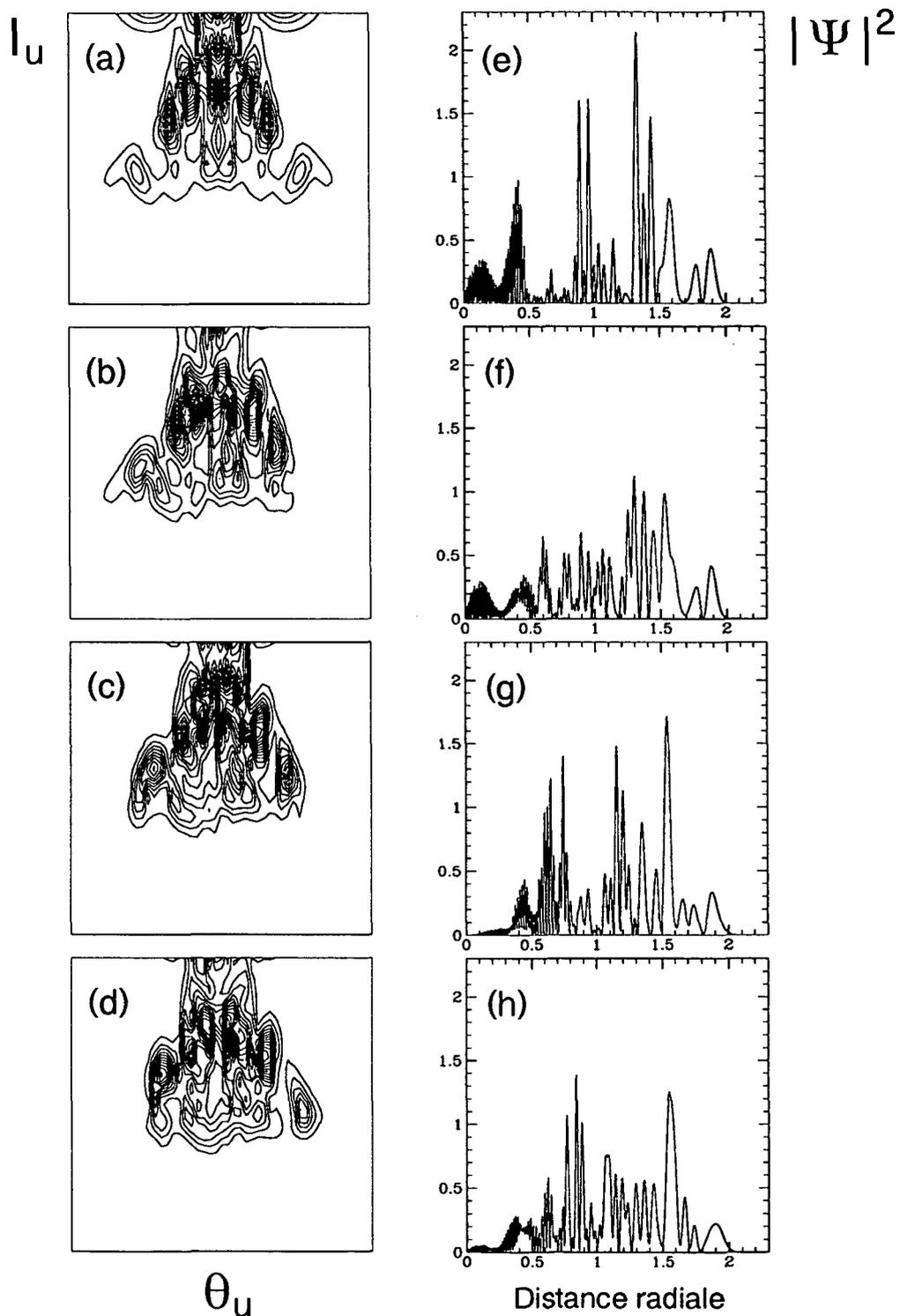


FIG. 5.39 - Évolution temporelle de l'état de Floquet représenté à la figure 5.24 (d), dans la représentation de Husimi (première colonne) ainsi que de configuration (deuxième colonne). Échelles comme sur les figures précédentes. Phase du champ $\omega_0 t_0 =$ (a), (e): 0; (b), (f): $\frac{\pi}{4}$; (c), (g): $\frac{\pi}{2}$; (d), (h): $\frac{3\pi}{4}$.

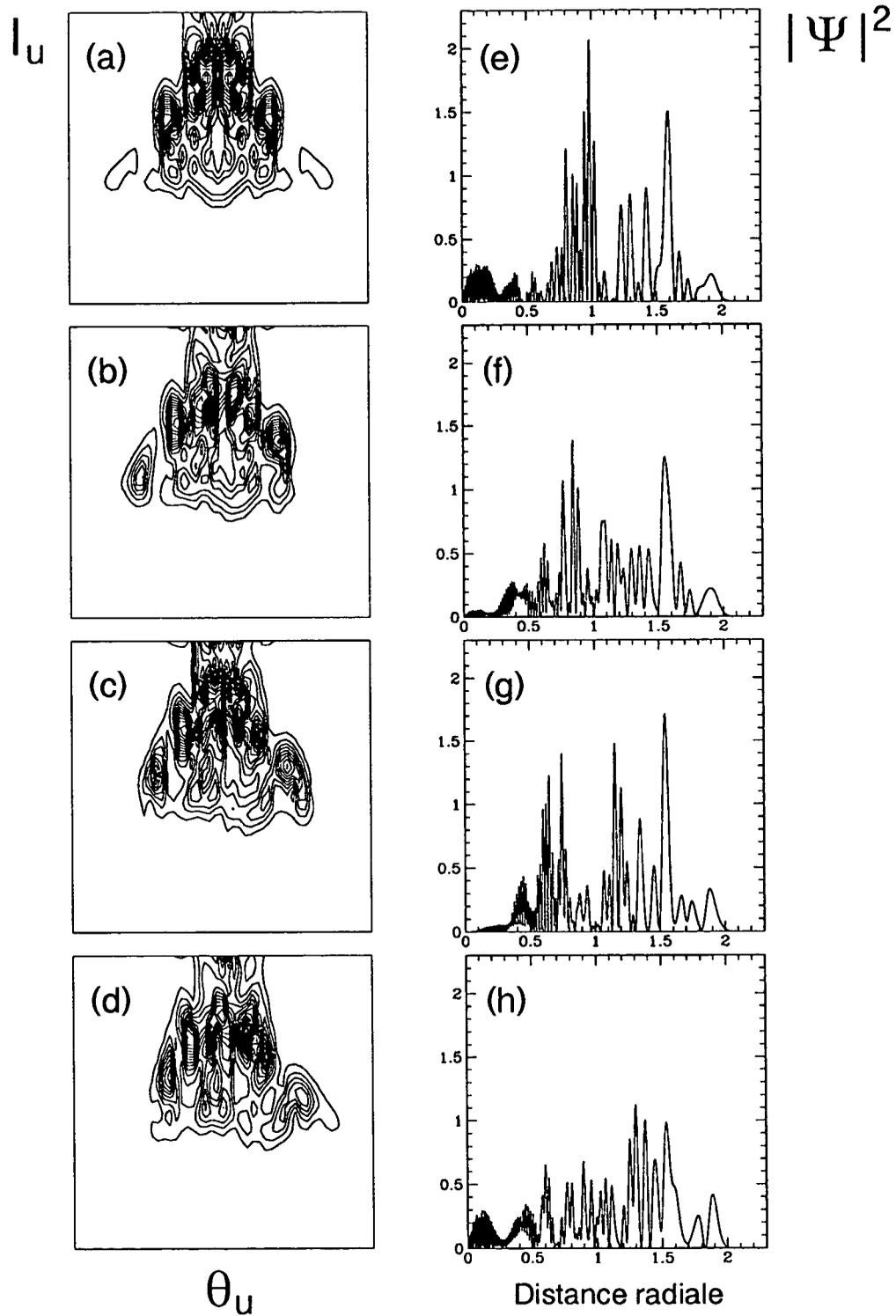


FIG. 5.40 - Suite de la figure 5.39. Phase du champ $\omega_0 t_0 =$ (a), (e): π ; (b), (f): $\frac{5\pi}{4}$; (c), (g): $\frac{3\pi}{2}$; (d), (h): $\frac{7\pi}{4}$.

typiquement accessibles dans les expériences actuelles. Notons ici surtout l'apparition des structures non monotones dans le signal d'ionisation en fonction de F_0 , dont la position et l'importance montrent une sensibilité notable vis-à-vis des paramètres expérimentaux F_0 , ω_0 et t . Ces structures semblent ainsi reliées aux "fluctuations universelles" de conductivité dont un équivalent a été prévu pour le transport quantique dans l'atome d'hydrogène en champ micro-onde [16, 17, 18]. Cette étude nous a mené à une critique de l'interprétation [36, 42] des expériences de Koch et al. [28], notamment en ce qui concerne l'attribution de la "stabilité anormale" à une cicatrice d'un état de Floquet individuel. Nous avons mis en évidence l'importance du temps d'interaction pour la localisation exacte de telles structures et avons aussi étudié la dépendance temporelle du seuil d'ionisation $F_0(10\%)$, sur plusieurs ordres de grandeurs de t . Le dernier résultat nous a fourni une explication qualitative pour les résultats obtenus dans l'ionisation du rubidium dans le groupe de H. Walther [32, 44] à Munich.

Nous avons étudié la projection de quelques états propres représentatifs de ce modèle dans l'espace des phases classique. Nous nous sommes notamment intéressés à la corrélation entre leurs propriétés de localisation et leurs couplages au continuum. Nous avons observé une telle corrélation, ainsi qu'une cicatrice d'un état propre qui peut en effet être associée à une structure instable individuelle dans l'espace des phases classique [36, 42]. Pourtant, cette corrélation ne permet pas une relation univoque entre la localisation dans l'espace des phases et la stabilité d'un état propre vis-à-vis de l'ionisation par le champ. L'exemple d'un autre état de Floquet suggère plutôt une explication semiclassique de la stabilité relative des divers états propres. Celui-ci et la dynamique temporelle de la cicatrice sont fortement en faveur des modèles plus anciens attribuant un rôle principal au cantores [51, 52] et "vague tori" [53, 54, 55, 56, 57] pour la suppression quantique du transport chaotique dans l'espace des phases.

Finalement, nous avons étudié la dynamique temporelle de quelques états de Floquet, dans l'espace des phases et dans l'espace de configuration. Nous avons fourni l'exemple d'un paquet d'onde "classique" *non-dispersif*, ainsi que d'une fonction d'onde "chaotique".

Chapitre 6

Les atomes “réels” dans un champ oscillant

Dans ce chapitre, nous présentons les résultats d’une simulation de l’ionisation d’un atome d’hydrogène “réel”. Cela veut dire que nous partons d’un modèle numérique qui prend en compte non seulement le couplage au continuum, mais aussi *tous* les degrés de liberté de l’atome tridimensionnel.

Nous allons d’abord appliquer cette approche générale à un atome préparé dans un état de Rydberg de faible valeur du moment cinétique et donc de grande excentricité de la trajectoire classique de l’électron [8, 31]. Cela nous permettra une comparaison avec les résultats obtenus dans le chapitre précédent, à partir d’un modèle unidimensionnel de l’atome. Une partie des observations de ce premier paragraphe a donné lieu à une publication [151].

Nous étudierons ensuite quelques caractéristiques spectrales du problème tridimensionnel, la dynamique de quelques états de Floquet spécifiques, et la dépendance du seuil d’ionisation vis-à-vis du choix de l’état initial des atomes.

Ceci sera suivi de la présentation d’une cicatrice de l’atome réel exposé au champ micro-onde, ainsi que d’autres états d’allure et de dynamique “classique”.

Le chapitre sera terminé par l’étude d’un exemple de la dynamique quantique dans le régime optique (cf. 6.3), afin d’établir un lien entre ce domaine et le domaine micro-onde.

6.1 L’ionisation d’un état de haute excentricité

Dans une première étape, nous allons comparer le modèle réaliste de l’atome tridimensionnel et les résultats fournis par le modèle unidimensionnel. Cela implique le choix d’un état initial de grande excentricité et d’orientation le long de l’axe de polarisation du champ, afin d’avoir des conditions initiales approximativement unidimensionnelles [8, 31].

Pourtant, nous ne choisissons pas ici un état parabolique extrême (cf. 4.2.2) qui serait l’état “unidimensionnel” par excellence [33], mais plutôt un état p [31], c’est-à-dire un représentant $|n_0 \ell_0 = 1 \ m_0 = 0\rangle$ de la base sphérique. Cet

état est orienté le long du champ mais relativement *délocalisé selon les directions angulaires*. L'excitation de l'atome à partir d'un tel état va nous permettre

- de révéler le comportement essentiellement similaire de l'excitation suivant les différents canaux ℓ vers le continuum, ce qui justifie l'approche unidimensionnelle;
- de cerner les limites de l'image unidimensionnelle, dans la mesure où elle implique une anisotropie du processus d'ionisation (par l'orientation spatiale de la densité électronique).

L'état p est, de plus, un des états typiquement peuplés dans les expériences de Koch et al. [10, 28]. Nous avons déjà mentionné plusieurs fois que ces expériences ne définissent que le nombre quantique principal de l'état initial des atomes et nécessitent donc d'utiliser tout l'espace des phases six-dimensionnel du problème. Comme le nombre le plus important de données expérimentales a été fourni par ce groupe, elles vont nous guider aussi pendant ce chapitre.

Notre état atomique de départ sera l'état $|n_0 = 23 \ell_0 = 1 m_0 = 0\rangle$, à comparer à la simulation de l'ionisation de l'état $|n_0 = 23\rangle$ au chapitre 5. Comme nous l'avons déjà mentionné (cf. 5.3), cette valeur de n_0 est plus basse que la valeur typique des expériences réelles, à cause de la taille mémoire limitée des ordinateurs accessibles pour nos calculs. La comparaison qualitative aux expériences sera donc encore fondée sur les lois d'échelle classiques (3.19), ce que nous avons déjà justifié pour nos calculs 1D (cf. 5.3). Nous prenons la même démarche que dans le cas unidimensionnel, en passant par les mêmes étapes dans l'approche numérique que dans les expériences réelles (cf. 5.2).

La figure 6.1 montre la probabilité d'ionisation P_{ion} de l'état $|n_0 = 23 \ell_0 = 1 m_0 = 0\rangle$ en fonction du temps d'interaction t , en comparaison avec une décroissance monoexponentielle. Les valeurs de la pulsation et de l'amplitude réduite du champ de micro-onde sont $\omega_0 = 0.608$ et $F_0 = 0.033$. La comparaison à la courbe correspondante obtenue pour la simulation unidimensionnelle (montrée à la figure 5.1) souligne le caractère général du comportement multiexponentiel de $P_{ion}(t)$, tel qu'elle est implicite déjà dans l'équation (4.61).

Pour obtenir un signal d'ionisation en fonction de l'amplitude du champ, il faut répéter la "mesure" (cf. 5.2) de la figure 6.1 pour différentes valeurs de F_0 . Le temps d'interaction correspondant à la valeur du temps réduit des expériences de Koch et al. (à la pulsation $\omega_0 \simeq 1.3$) vaut $t = 4.6 \times 10^{-10}$ s.

La diagonalisation numérique de l'hamiltonien du problème tridimensionnel demande environ deux à quatre heures de temps CPU sur un CRAY-2 et nécessite environ 800 à 2 Go de mémoire centrale. Il est alors hors de question de balayer l'amplitude du champ sur l'intervalle entier, correspondant à des probabilités d'ionisation entre 0% et 100%. Nous nous sommes alors contentés de ne calculer la probabilité d'ionisation que pour les valeurs au voisinage du seuil d'ionisation.

La figure 6.2 montre un cas typique pour $\omega_0 = 2.5$, en comparaison avec le signal d'ionisation "complet", fourni par le modèle unidimensionnel. Notons que

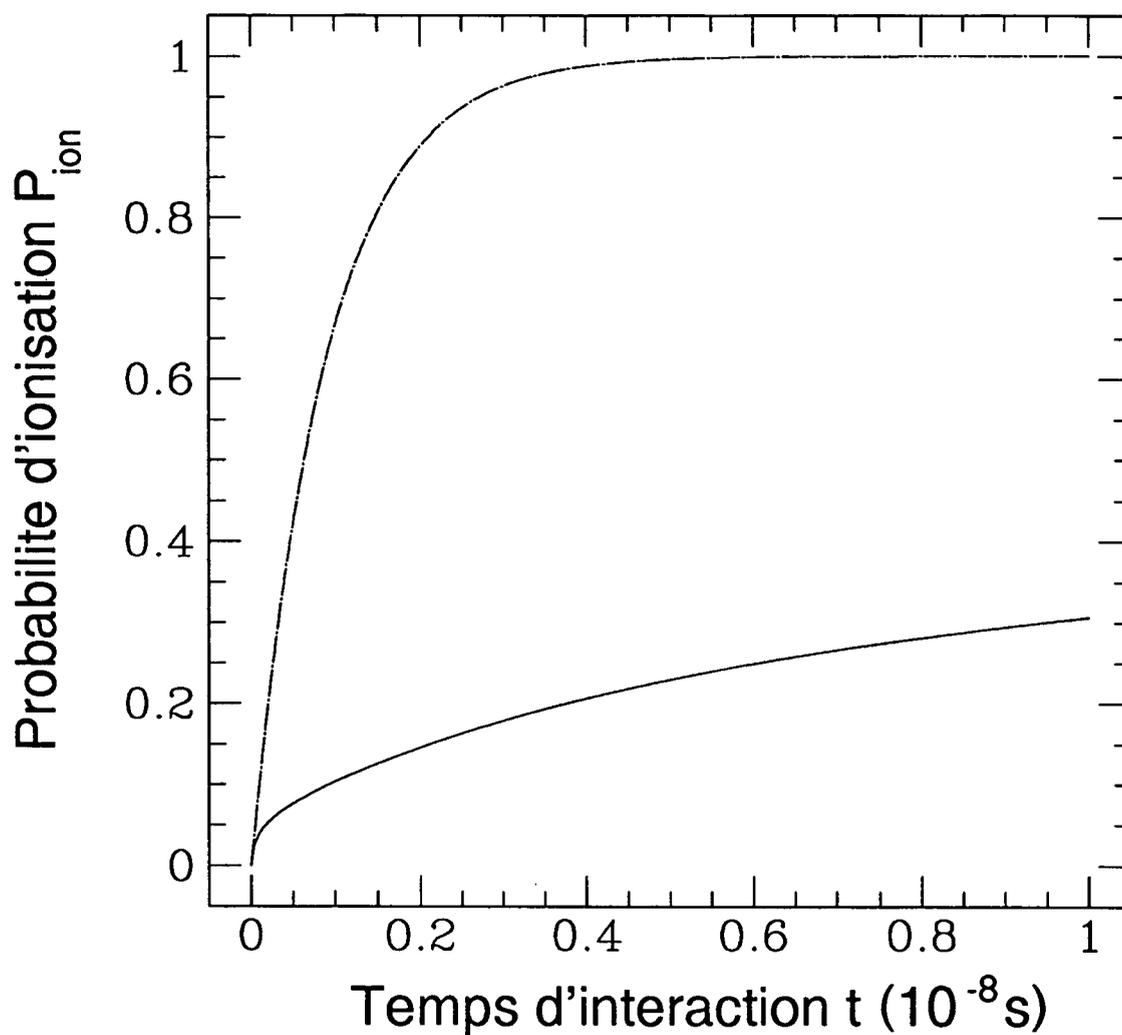


FIG. 6.1 - Probabilité d'ionisation de l'état $|n_0 = 23 \ l_o = 1 \ m_0 = 0 \rangle$ par un champ micro-onde de pulsation réduite $\omega_0 = \omega n_0^3 = 0.608$ et d'amplitude réduite $F_0 = F n_0^4 = 0.033$, en fonction du temps d'interaction t .

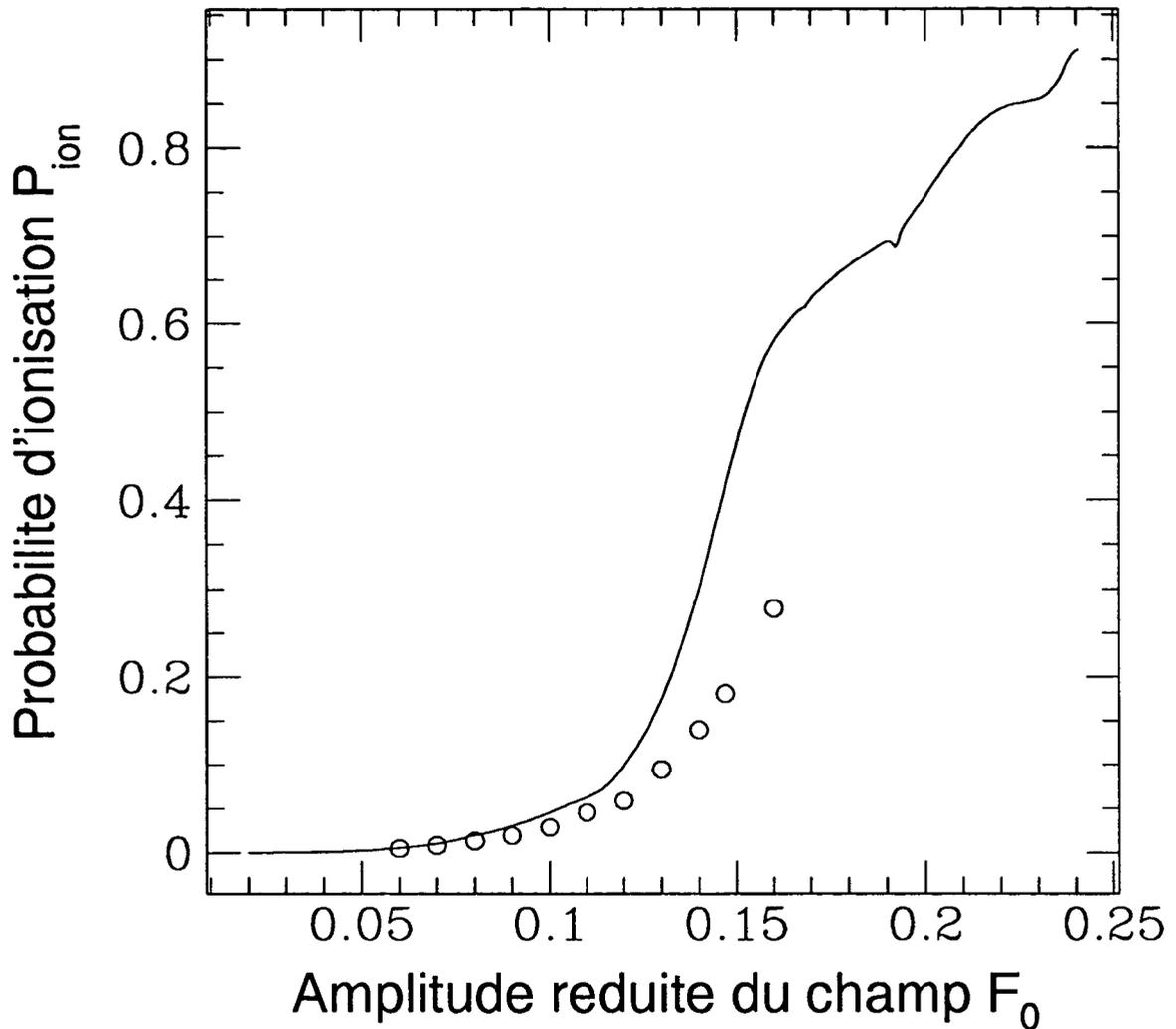


FIG. 6.2 - Signaux d'ionisation obtenus à partir du modèle unidimensionnel (état initial $|n_0 = 23 \rangle$) de l'atome (ligne continue) et de la simulation du système "réel" (état initial $|n_0 = 23 \ell_0 = 1 m_0 = 0 \rangle$, cercles ouverts), à pulsation réduite $\omega_0 = 2.5$ (temps d'interaction $t = 4.6 \times 10^{-10}$ s).

la simulation 3D reproduit bien le faible épaulement qui est visible dans le signal d'ionisation 1D sur l'intervalle $F_0 \simeq 0.08 \dots 0.12$. De plus, le seuil du modèle unidimensionnel et celui montré par le système "réel" sont très proches l'un de l'autre aux basses valeurs de P_{ion} , mais cet écart augmente légèrement à des taux d'ionisation plus élevés. Il ne s'agit pas avec cet écart d'une tendance générale, et le comportement inverse est parfois observé (cf. fig. 6.3).

Après avoir procédé de même manière pour plusieurs valeurs de la pulsation réduite (en changeant ω_0 par un changement de ω , à $n_0 = 23$ fixe; cf. 5.2, 5.3), nous arrivons à la comparaison des seuils d'ionisation de l'atome unidimensionnel (cf. 5.3) avec ceux de l'état p considéré dans la section présente, ainsi qu'avec la prévision de la théorie de la localisation dynamique [7, 16] et les résultats de Koch et al. [28, 135] sur la figure 6.3.

De toute évidence, on ne constate pas de différence systématique entre le modèle unidimensionnel et le comportement d'ionisation de l'état p . Le modèle unidimensionnel semble donc une très bonne approximation pour l'ionisation des états orientés le long du vecteur de polarisation du champ micro-onde. On trouve, en fait, que le seuil d'ionisation ne dépend que très faiblement de la valeur du moment cinétique ℓ sur un intervalle de $\ell \simeq 0, \dots, 15$, à $n_0 = 23$ et $m_0 = 0$ fixés. Une étude systématique préliminaire de cette dépendance semble suggérer un très faible ("shallow") minimum de $F_0(10\%)$ au voisinage de $\ell \simeq 10$, ce qui serait d'ailleurs cohérent avec une remarque à propos d'une simulation classique récente [76].

Ceci représente un premier argument en faveur d'un comportement similaire des différents états ℓ pendant l'ionisation, comme nous l'avions postulé ci-dessus. Par conséquent, nos remarques antérieures (cf. 5.4, 5.5, 5.7.2) à propos des expériences du groupe de Stony Brook comme de la théorie de la localisation dynamique ne sont pas affectées.

Finalement, la dépendance temporelle du seuil d'ionisation est aussi très faible dans *les deux* modèles, au moins pour un changement de t de l'ordre de six, comme nous le montrons sur la figure 6.4. Pourtant, la figure montre aussi que l'écart entre $F_0(10\%; t_1)$ et $F_0(10\%; t_2)$ est systématiquement légèrement plus important dans le cas de l'atome réel que dans celui de l'approximation unidimensionnelle, sauf aux valeurs de ω_0 correspondant à l'apparition d'une structure non-monotone dans le signal d'ionisation de l'état $|n_0 = 23\rangle$.

Une comparaison systématique de la dépendance temporelle exhibée par les modèles uni- et tridimensionnels sur plusieurs ordres de grandeur de t n'a jusqu'ici pas été possible, encore à cause du temps de calcul trop important sur un ordinateur de type CRAY2. Il en est de même pour l'apparition des structures non-monotones dans l'ionisation de l'atome réel, qui demanderait des signaux d'ionisation quasicontinus en fonction de F_0 (cf. la figure 6.2).

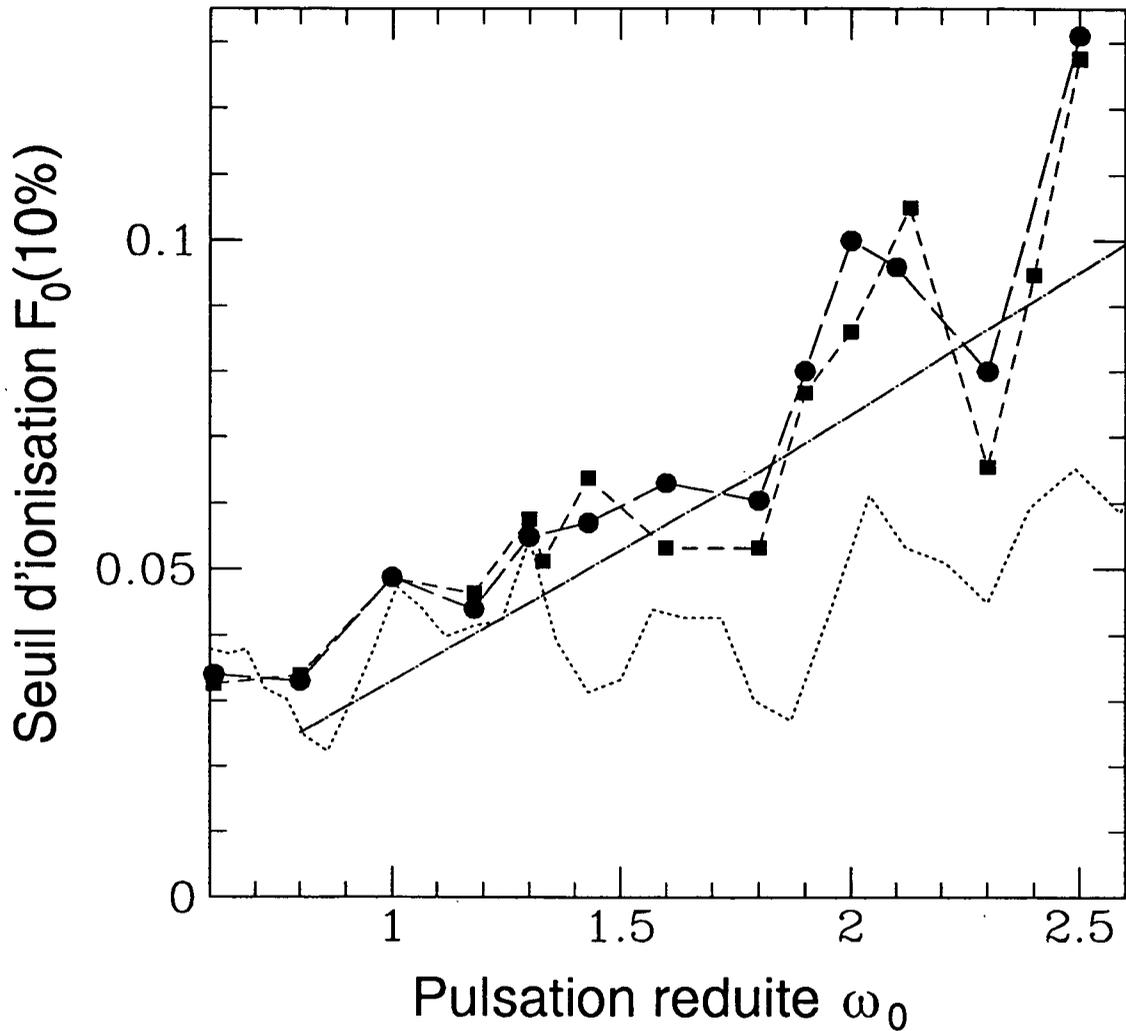


FIG. 6.3 - Seuils d'ionisation de l'état $|n_0 = 23 \ell_0 = 1 m_0 = 0\rangle$ en fonction de la pulsation réduite ω_0 (cercles pleins), en comparaison avec le résultat du modèle numérique unidimensionnel (voir figure 5.3) obtenu pour l'ionisation de l'état initial $|n_0 = 23\rangle$ (carrés pleins). Temps d'interaction physique $t = 4.6 \times 10^{-10}$ sec, correspondant à $t_0/2\pi = 249$ passages de l'électron au périhélie. Ligne pointillée: Résultats expérimentaux de Galvez et al.[28], obtenus pour $\omega/2\pi = 36.02$ GHz, $t \simeq 9.1 \times 10^{-9}$ s et $n_0 = 57, \dots, 78$. Trait discontinu pointillé: Seuil de délocalisation quantique d'après Casati et al.[16], eq. (5.2), avec $n_0 = 62$ et un seuil de continuum effectif à $n_c = 90$.

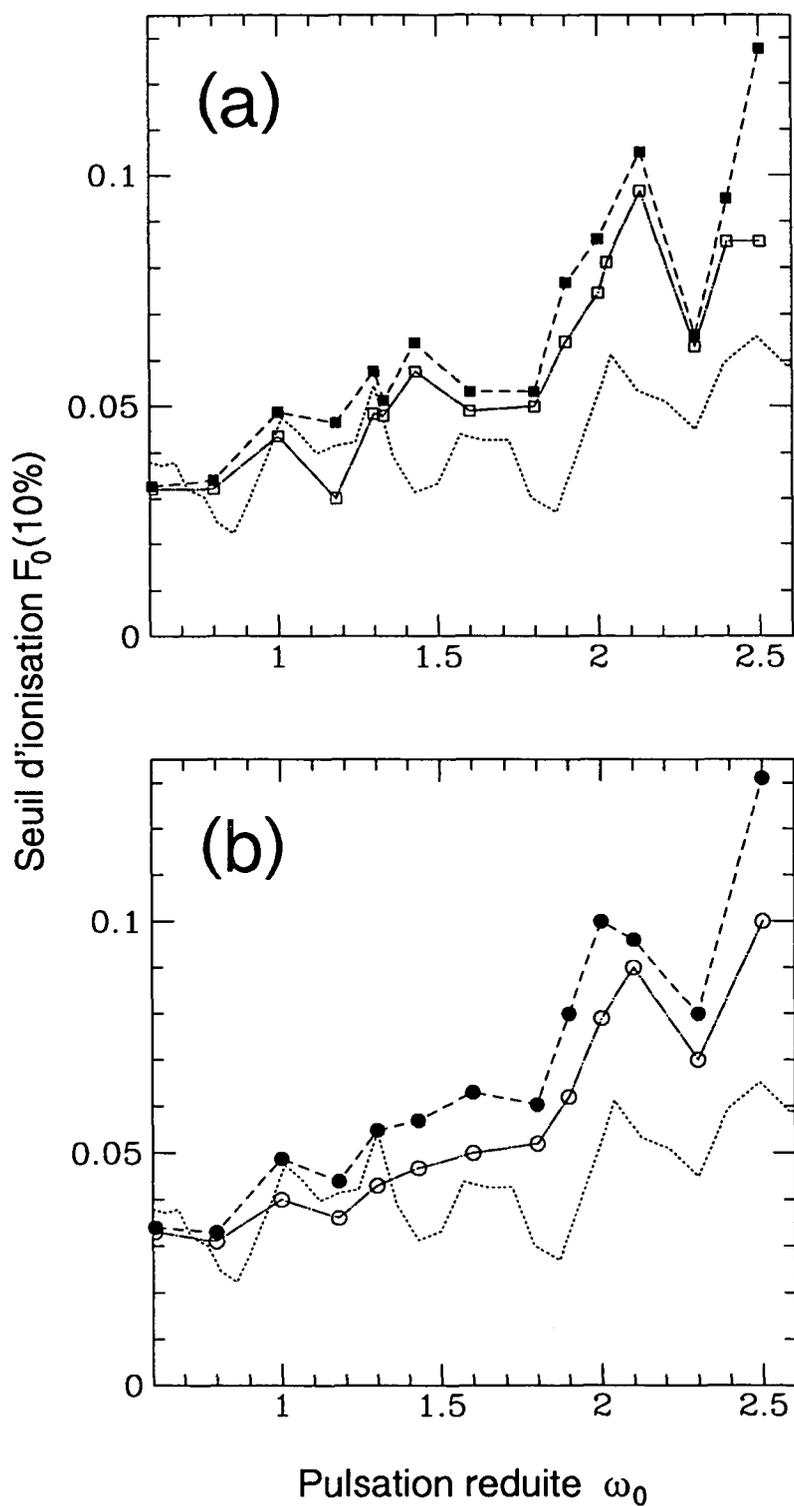


FIG. 6.4 - Ionisation de l'état $|n_0 = 23\rangle$ (a) et de l'état $|n_0 = 23, l_0 = 1, m_0 = 0\rangle$ (b) par un champ micro-onde, pour deux valeurs différentes du temps d'interaction. Symboles pleins: $t = 4.6 \times 10^{-10}$ s, symboles ouverts: $t = 2.9 \times 10^{-9}$ s. La ligne pointillée marque les résultats expérimentaux de Galvez et al.[28], voir figure 6.3.

6.2 Aspects spectraux et fonctions propres

Afin d'obtenir une idée plus précise du transport de probabilité quantique dans l'atome réel, nous abordons maintenant une analyse locale d'un spectre de Floquet et des résonances correspondantes.

Nous venons de voir que *l'ionisation* d'un état initial de l'atome réel orienté le long du champ est bien décrite par le modèle unidimensionnel de l'hydrogène. Essayons de voir dans quelle mesure ce comportement *effectivement* unidimensionnel peut être compris par exemple à partir des propriétés de localisation spatiale (et ainsi en n et ℓ) des fonctions propres des résonances. Cela nous conduit aux questions suivantes:

1. Partant d'un état de haute excentricité et de faible excitation angulaire, quelles seront les propriétés de localisation spatiale des résonances qui dominent la dynamique quantique (ayant un recouvrement important avec l'état initial)?
2. Ces propriétés, se traduisent-elles de manière systématique sur les taux de décroissance des états de Floquet vers le continuum?
3. Quelles sont les conséquences de ces propriétés pour la dynamique temporelle des états propres? Comment se traduisent-elles sur les seuils d'ionisation correspondants?
4. Est-ce qu'il y a des cicatrices le long d'orbites instables et quels sont les états initiaux pour les exciter de manière efficace (cf. 1.1.2, 5.7.2)?

Nous essayons d'y répondre dans les paragraphes suivants.

Nous nous contentons de l'analyse d'un seul spectre de Floquet, comportant environ 1400 états propres (y compris les états de continuum). Les paramètres que nous avons choisis sont $F_0 = 0.0549$, $\omega_0 = 1.304$, et $m_0 = 0$. Les valeurs de F_0 et ω_0 correspondent donc à la position de la "stabilité anormale" de Koch et al. [10, 28] (cf. 5.4, 5.5, 5.7.2), sur laquelle nous reviendrons au paragraphe 6.2.4.

6.2.1 Zoologie générale des états de Floquet

Pour répondre à la première question formulée ci-dessus, nous avons d'abord besoin d'une vue générale sur les états propres compris dans le spectre de Floquet.

A ce propos nous montrons, sur les figures 6.5 à 6.7 et en coordonnées cylindriques z, ρ , les contours d'une sélection représentative de densités de probabilité d'états propres. Il s'agit, en fait, des densités électroniques *moyennées* sur une période de la perturbation. Cela nous conduit aux mêmes conclusions qu'une représentation à phase $\omega_0 t_0$ définie (cf. 6.2.3 et 6.2.4, mais la génération des figures demande un temps de calcul moins important. A part les figures 6.6 (a) et 6.7 (g), toutes les figures sont portées avec les mêmes échelles suivant z et ρ (± 1200 a.u.). Les états sont ordonnés suivant leur durée de vie, en ordre décroissant. Tous ont une durée de vie de l'ordre de ou plus longue que le temps

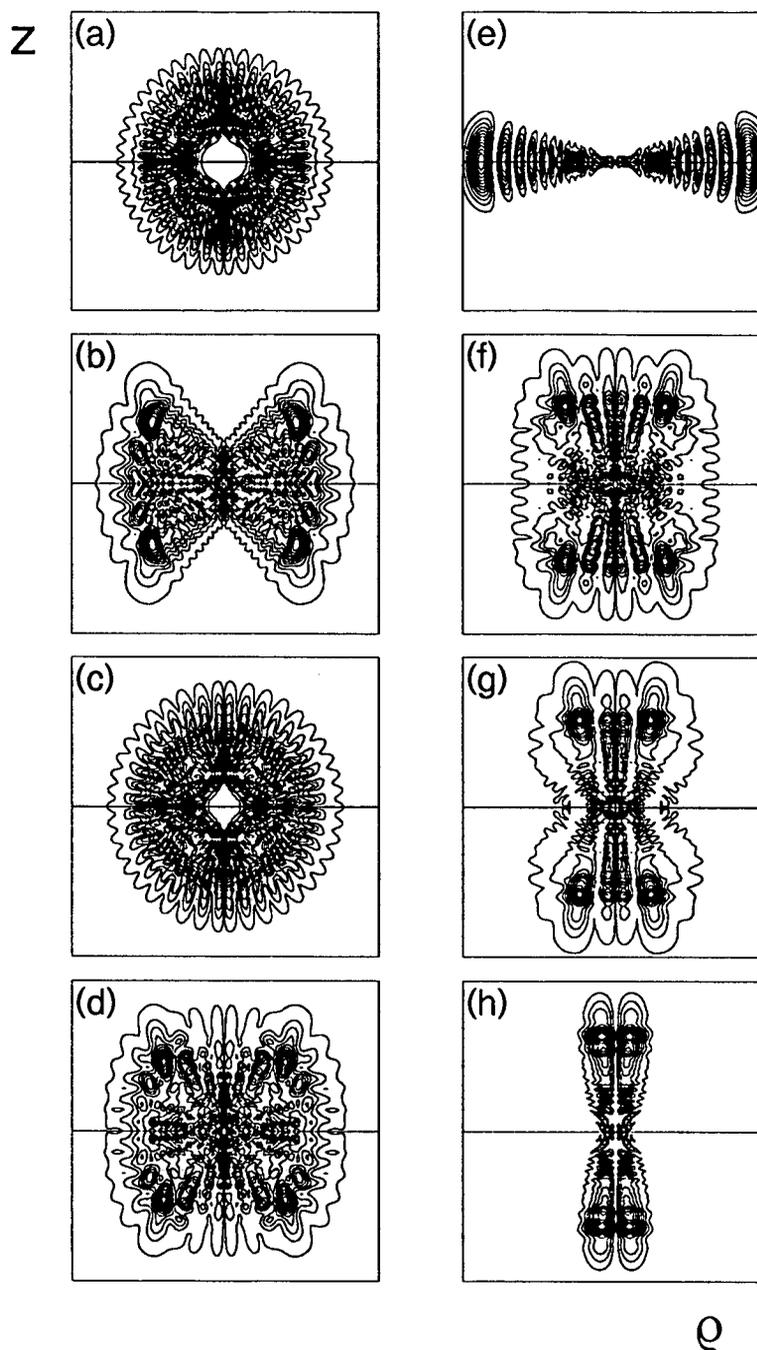


FIG. 6.5 - Densités de probabilité moyennée sur un cycle de la perturbation de quelques états de Floquet représentatifs du spectre d'un atome d'hydrogène dans un champ micro-onde de pulsation réduite $\omega_0 = 1.304$ et d'amplitude réduite $F_0 = 0.0549$, en coordonnées cylindriques $z, \rho = \pm 1200$ a.u.. Les états sont ordonnés d'après leur durée de vie, en ordre décroissant. La valeur entre parenthèses indique le recouvrement avec l'état $|n_0 = 23 \ell_0 = 1 m_0 = 0\rangle$, si celui est plus grand que 1%. (a) $\text{Re}\epsilon = -9.3455823 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -6.7 \times 10^{-15}$; (b) $\text{Re}\epsilon = -9.3550650 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -5.0 \times 10^{-14}$, (2.0%); (c) $\text{Re}\epsilon = -9.3533692 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -5.5 \times 10^{-14}$; (d) $\text{Re}\epsilon = -9.7562445 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -2.7 \times 10^{-13}$; (e) $\text{Re}\epsilon = -9.3592612 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -3.3 \times 10^{-13}$, (1.5%); (f) $\text{Re}\epsilon = -9.3608320 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -8.7 \times 10^{-13}$, (1.3%); (g) $\text{Re}\epsilon = -9.3622056 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -2.1 \times 10^{-12}$, (1.8%); (h) $\text{Re}\epsilon = -9.3632151 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -3.6 \times 10^{-12}$, (1.5%).

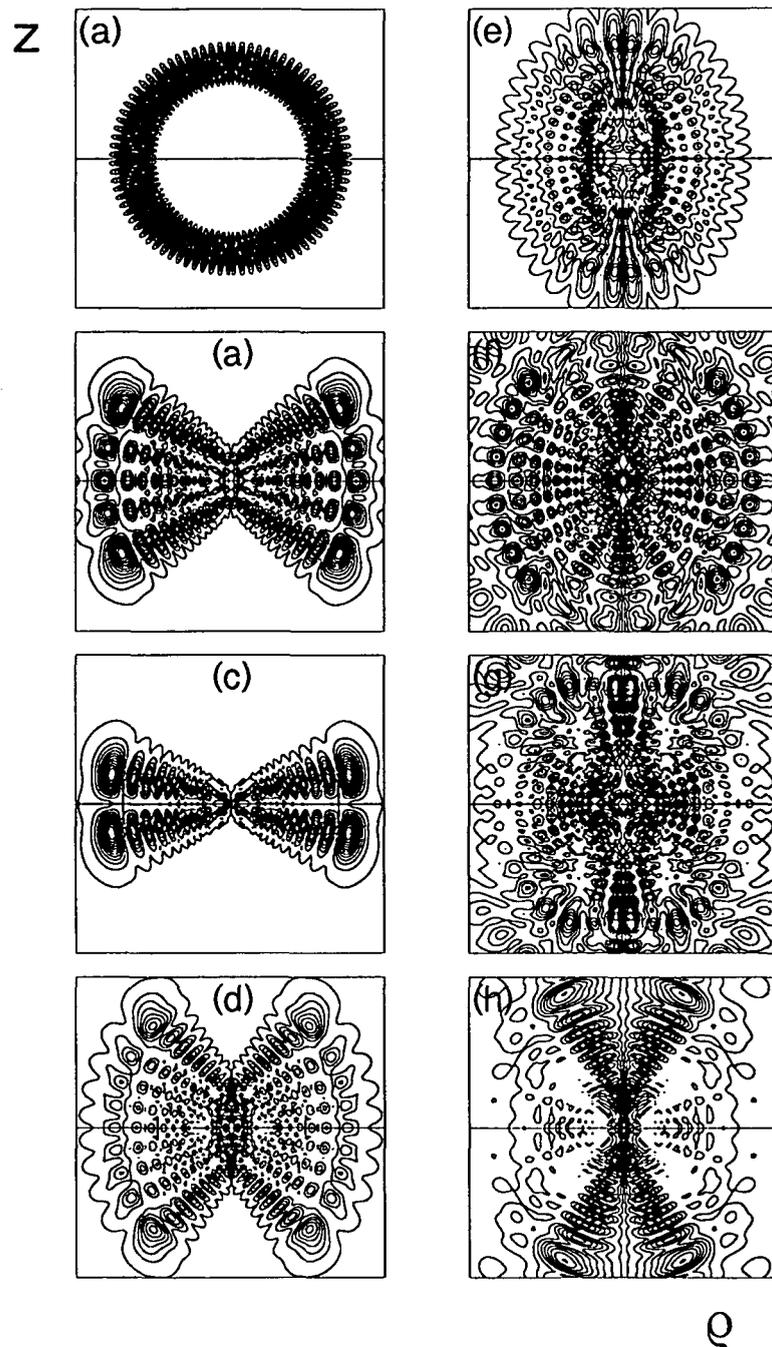


FIG. 6.6 - Suite de la figure 6.5, sur les mêmes échelles, sauf pour l'état représenté en (a). (a) $z, \rho = \pm 2800$ a.u., $\text{Re}\epsilon = -9.2648355 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -1.7 \times 10^{-11}$; (b) $\text{Re}\epsilon = -9.7711431 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -1.8 \times 10^{-11}$, (1.1%); (c) $\text{Re}\epsilon = -9.4493343 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -3.7 \times 10^{-11}$, (11.8%); (d) $\text{Re}\epsilon = -9.7816878 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -8.0 \times 10^{-11}$, (1.8%); (e) $\text{Re}\epsilon = -9.7956747 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -3.5 \times 10^{-10}$; (f) $\text{Re}\epsilon = -9.0948680 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -1.1 \times 10^{-9}$; (g) $\text{Re}\epsilon = -9.0944365 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -1.3 \times 10^{-9}$; (h) $\text{Re}\epsilon = -9.0968834 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -1.4 \times 10^{-9}$, (1.1%).

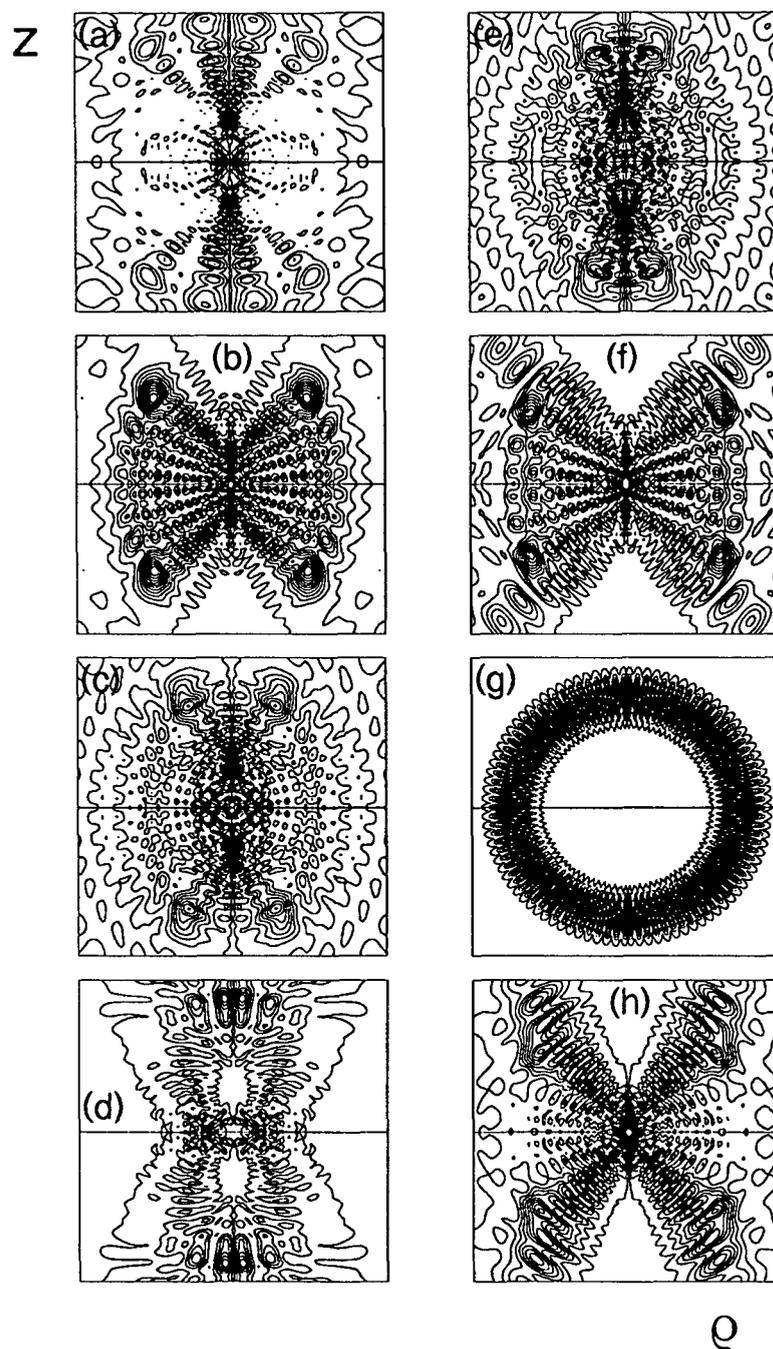


FIG. 6.7 - Suite de la figure 6.6, sur les mêmes échelles, sauf pour l'état représenté en (g). (a) $\text{Re}\epsilon = -9.0958291 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -1.6 \times 10^{-9}$; (b) $\text{Re}\epsilon = -9.4891761 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -1.7 \times 10^{-9}$, (8.0%); (c) $\text{Re}\epsilon = -9.4979518 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -1.9 \times 10^{-9}$, (3.2%); (d) $\text{Re}\epsilon = -9.0935305 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -2.0 \times 10^{-9}$; (e) $\text{Re}\epsilon = -9.4998320 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -2.3 \times 10^{-9}$, (1.4%); (f) $\text{Re}\epsilon = -9.4752152 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -4.7 \times 10^{-9}$, (4.6%); (g) $z, \rho = \pm 3000$ a.u., $\text{Re}\epsilon = -9.7655367 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -5.5 \times 10^{-9}$; (h) $\text{Re}\epsilon = -9.4646734 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -9.1 \times 10^{-9}$, (8.7%).

d'interaction de l'expérience de Stony Brook, correspondant, avec (3.19) et (5.4), à

$$|\operatorname{Im}\epsilon| \leq 2.8 \times 10^{-9}. \quad (6.1)$$

Remarquons d'abord que l'excitation radiale des états, qui correspond au nombre quantique principal de l'état non-perturbé hydrogénoïde, varie notablement sur la suite des trois figures, mais pas de manière systématique. Cela implique (cf. (3.19)) que les différents états de Floquet voient des pulsations et des amplitudes réduites différentes.

Cet effet est le plus prononcé pour les deux états avec $m_0 = 0$ et $l_0 = n_0 - 1$ maximal, représentés sur les figures 6.6 (a) et 6.7 (g). Il s'agit de deux états circulaires inclinés comme nous les avons introduits au chapitre 4.2.2. Le premier des deux, avec 41 nœuds angulaires et aucun nœud radial, est l'état de Floquet issu de l'état $|n_0 = 42 \ell_0 = 41 m_0 = 0\rangle$. Il voit donc une pulsation réduite de $\omega_0 = 1.304 \times (42/23)^3 = 7.94$ et une amplitude réduite de $F_0 = 0.0549 \times (42/23)^4 = 0.6105$. Le deuxième, avec $l_0 - m_0 = 46$, correspond à $|n_0 = 47 \ell_0 = 46 m_0 = 0\rangle$, et l'on trouve de la même façon $\omega_0 = 11.127$ et $F_0 = 0.9573$. Comme tous les autres états ont une extension spatiale de moins de ± 1200 a.u., ceux-ci voient des amplitudes et des pulsations réduites effectives inférieures.

Pour répondre ensuite à la question 1) ci-dessus, quels sont les états propres dominant la dynamique quantique pendant l'ionisation de l'état $|23 \ 1 \ 0\rangle$? Ce sont les états de Floquet qui

- survivent pendant le temps expérimental de Stony Brook (donc $|\operatorname{Im}\epsilon| \leq 2.8 \times 10^{-9}$, d'après (6.1));
- ont un recouvrement de plus de 1% avec $|23 \ 1 \ 0\rangle$.

Il y a 14 tels états représentés sur les figures 6.5 à 6.7. Plus précisément, il s'agit des densités montrées sur les figures 6.5 (b), (d), (f), (g), (h), 6.6 (b), (c), (d), (h), 6.7 (b), (c), (e), (f), (h) (Nous incluons les états des figures 6.7 (f) et (h) dans nos considérations à cause de leurs recouvrements importants avec l'état initial, bien que leurs largeurs soient légèrement supérieures à la valeur de (6.1)). Il est évident que ces états ne montrent *pas* de localisation préférentielle le long d'une coordonnée définie! Rappelons dans ce contexte la forme de l'équation (4.61), qui contient une somme sur tous les états propres avec une projection non négligeable sur l'état initial, et ainsi une moyenne *incohérente* sur les différentes contributions des différents états de Floquet. Des figures 6.5 à 6.7, on conclut que la "dimensionnalité" ou l'orientation des états impliqués dans cette somme ne joue qu'un rôle au plus secondaire pour l'ionisation de $|23 \ 1 \ 0\rangle$. Pour un tel état initial, l'ionisation semble s'effectuer de manière *isotrope*, bien que le seuil soit bien décrit par un modèle unidimensionnel (cf. 6.1)! Cette observation souligne encore (cf. le début de ce chapitre et 6.1) le rôle équivalent des différents canaux ℓ pour l'ionisation! Elle montre aussi que la simple connaissance du seuil $F_0(10\%)$ *ne suffit pas* pour conclure sur les propriétés de localisation des états excités par

la micro-onde, à partir d'un état initial $|n_0 = 23 \ell_0 m_0 = 0\rangle$ quelconque. Cette dernière remarque est d'une importance évidente pour l'interprétation des résultats de Koch et al. [10, 28]; nous y reviendrons au paragraphe 6.2.4.

En conclusion, les figures 6.5 à 6.7 montrent que *ni l'excitation radiale ou angulaire, ni le degré de localisation spatiale* des fonctions d'onde (étant équivalent au rapport de l'excitation radiale à celle angulaire), *ni la valeur de la barrière centrifuge* (caractérisant la distance minimum d'approche au noyau) ne fournissent un critère suffisant pour en déduire la durée de vie de l'état de Floquet associé. Nous allons voir dans la suite de ce chapitre que *uniquement ces trois caractéristiques ensemble permettent de conclure sur la durée de vie relative de différents états propres du spectre.*

6.2.2 Les familles de $n_0 = 21$, $n_0 = 23$ et $n_0 = 24$

Nous venons de voir, pendant notre réponse à la première des questions formulées au début de ce chapitre, qu'il n'y a pas de corrélation univoque entre le seuil d'ionisation et l'orientation des états de Floquet qui génèrent la dynamique quantique.

Pourtant, en réponse à notre deuxième question, nous allons voir dans ce paragraphe qu'il y a un lien très étroit entre l'orientation des états de Floquet et les durées de vie pour les familles d'états voisins dans le spectre. "Voisins" désigne ici un intervalle de 5% à 10% de la largeur d'une zone de Floquet (c'est-à-dire 5% à 10% de ω , cf. 4.1).

Par les parties réelles des quasiénergies indiquées dans les légendes des figures 6.5 à 6.7, ainsi que par l'allure des fonctions propres correspondantes, on est guidé à regrouper les états comme nous le faisons dans les figures 6.8 à 6.11 suivantes. Il s'agit en fait de familles d'états diabatement issus du même multiplet $n_0 = 21$ (fig. 6.9), $n_0 = 23$ (fig. 6.8), et $n_0 = 24$ (figs. 6.10 et 6.11).

Sur la figure 6.8 nous montrons six états propres issus de l'état $n_0 = 23$. Ils nous servent comme premiers indicateurs d'un comportement systématique de certains vecteurs et valeurs propres, aux énergies regroupées dans des sous-intervalles plutôt étroits le long de l'axe réel. *L'augmentation de l'énergie de liaison* de l'état propre est visiblement accompagnée d'un *retrécissement de l'excitation angulaire* [107], et, comme on le lit dans la légende de la figure, d'une *diminution de la largeur de la résonance représentée* (à l'exception de la comparaison des états (c) et (d)). Notons d'ailleurs que tous les états ont un recouvrement non négligeable avec l'état initial des atomes. Les densités de la figure 6.8 (e) et (f) représentent les états qui dominent la dynamique de l'état $23 P$ dans un champ micro-onde avec les paramètres $F_0 = 0.0549$ et $\omega_0 = 1.304$, exhibant un recouvrement de plus de 10% chacun avec $|23 \ 1 \ 0\rangle$.

La tendance, à l'intérieur d'un multiplet, d'une distribution de probabilité localisée le long de l'axe de polarisation du champ vers une distribution de probabilité localisée perpendiculairement à celui-ci, que la figure 6.8 semble suggérer, est confirmée de manière *strictement univoque* par les figures suivantes.

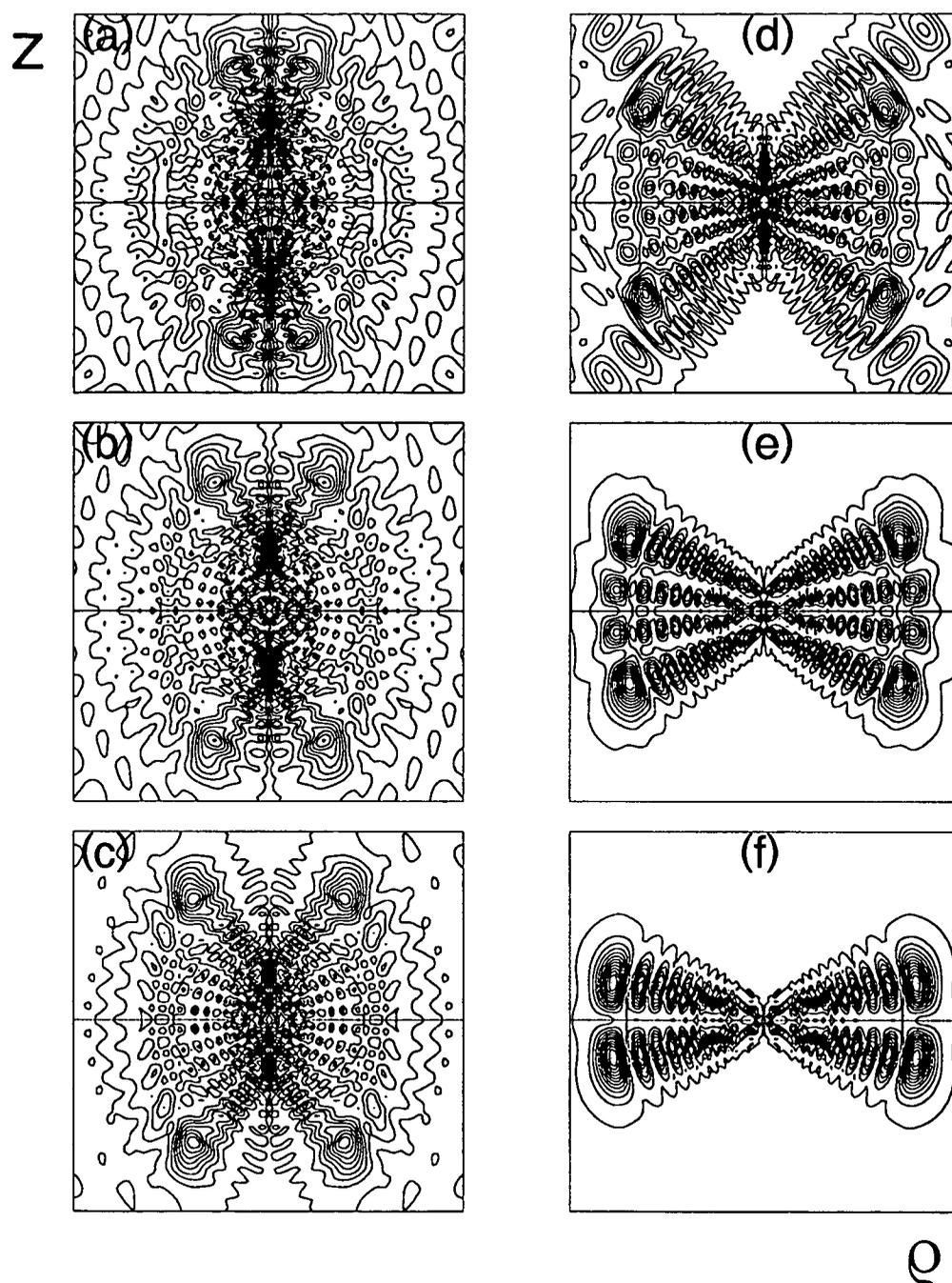


FIG. 6.8 - Etats propres de Floquet issus du multiplet $n_0 = 23$, à $F_0 = 0.0549$ et $\omega_0 = 1.304$, suivant l'ordre croissant de leurs énergies. Les parties imaginaires (correspondant aux largeurs des résonances) décroissent simultanément, à l'exception des états (c) et (d). Les valeurs entre parenthèses indiquent le recouvrement avec l'état $|n_0 = 23 \ell_0 = 1 m_0 = 0\rangle$. Échelles: $\rho, z = \pm 1200$ a.u.. (a) $\text{Re}\epsilon = -9.4998320 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -2.2661 \times 10^{-9}$, (1.4%); (b) $\text{Re}\epsilon = -9.4979518 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -1.9114 \times 10^{-9}$, (3.2%); (c) $\text{Re}\epsilon = -9.4945558 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -1.5223 \times 10^{-9}$, (5.6%); (d) $\text{Re}\epsilon = -9.4835924 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -4.6605 \times 10^{-9}$, (4.6%); (e) $\text{Re}\epsilon = -9.4675214 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -5.004 \times 10^{-10}$, (11.5%); (f) $\text{Re}\epsilon = -9.4577116 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -3.73 \times 10^{-11}$, (11.8%).

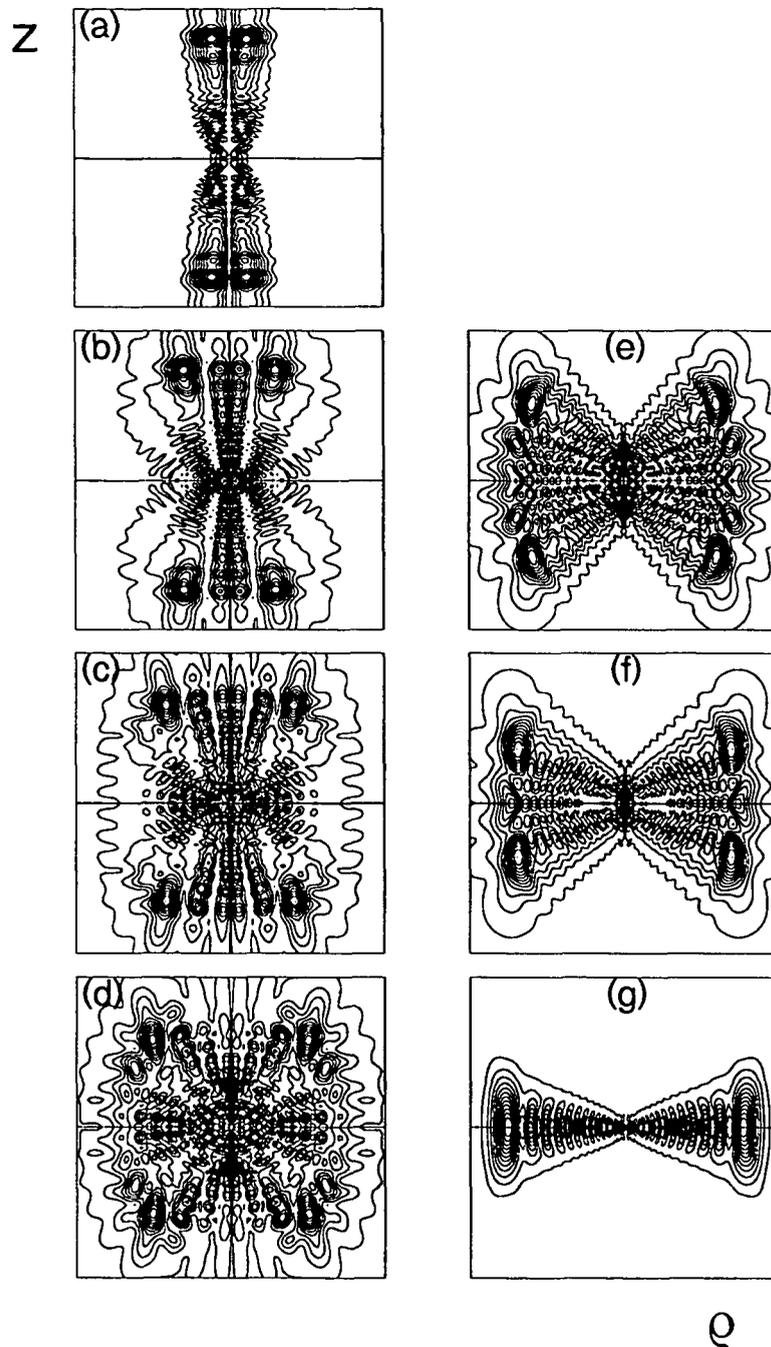


FIG. 6.9 - Multiplet du spectre de Floquet issu de la variété $n_0 = 21$ du spectre non perturbé. Les densités de probabilité représentées ($\rho, z = \pm 950$ a.u.) sont groupées suivant l'ordre croissant de leurs énergies. Les parties imaginaires décroissent simultanément. Quasiénergies (et recouvrements avec l'état $|n_0 = 23 \ell_0 = 1 m_0 = 0\rangle$) des états propres: (a) $\text{Re}\epsilon = -9.3632151 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -3.6 \times 10^{-12}$, (1.5%); (b) $\text{Re}\epsilon = -9.3622056 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -2.1 \times 10^{-12}$, (1.8%); (c) $\text{Re}\epsilon = -9.3608320 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -8.7 \times 10^{-13}$, (1.3%); (d) $\text{Re}\epsilon = -9.3592612 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -2.7 \times 10^{-13}$, (1.5%); (e) $\text{Re}\epsilon = -9.3550650 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -5.0 \times 10^{-14}$, (2.0%); (f) $\text{Re}\epsilon = -9.3455471 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -1.2 \times 10^{-14}$, (1.5%); (g) $\text{Re}\epsilon = -9.3242074 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -8.8 \times 10^{-15}$, (0.6%). Les parties imaginaires en dessous de 10^{-13} ne sont pas significatives.

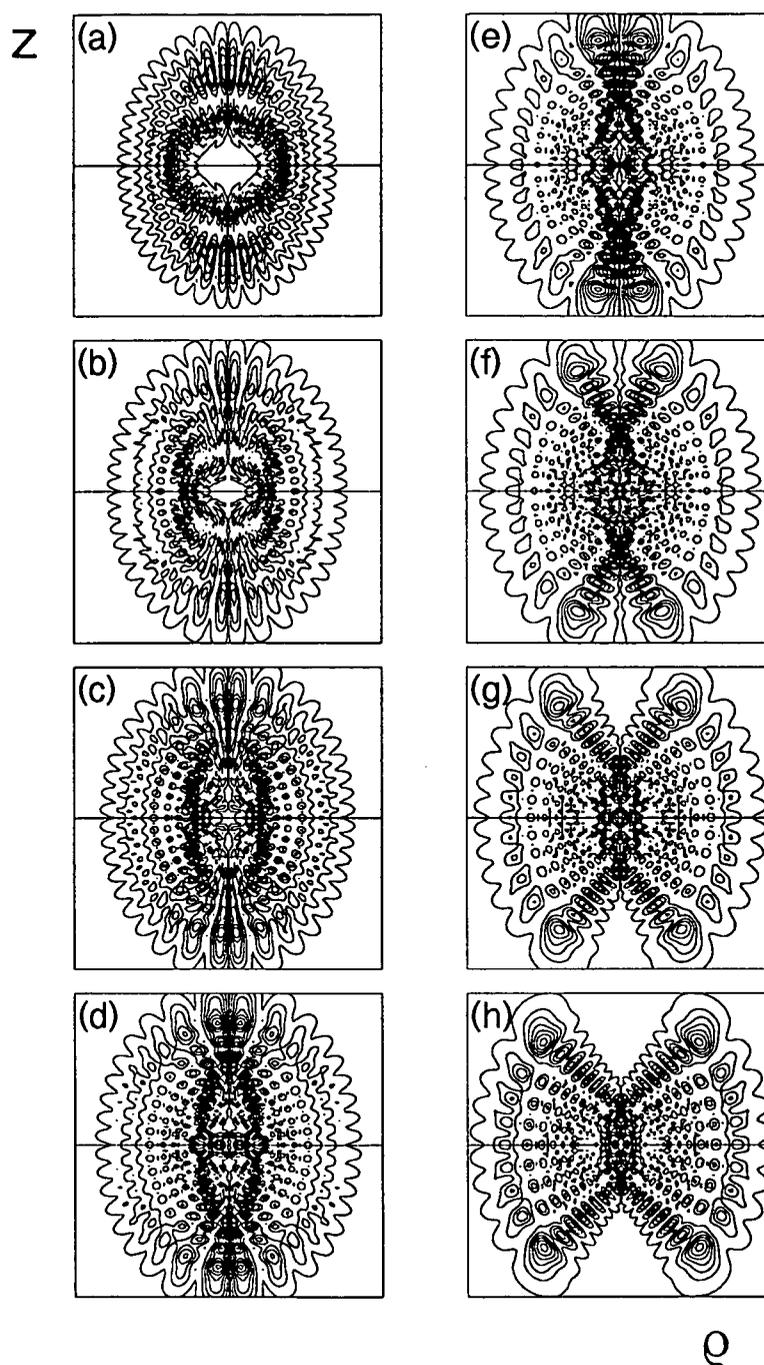


FIG. 6.10 - Multiplet du spectre de Floquet issu des états $n_0 = 24$ du spectre non perturbé. Les densités de probabilité représentées ($\rho, z = \pm 1200$ a.u.) sont groupées suivant l'ordre croissant de leurs énergies. Les recouvrements plus grands que 0.1% avec $|n_0 = 23 \ell_0 = 1 m_0 = 0\rangle$ sont indiqués entre parenthèses. Les 12 états représentés sur cette figure et à la figure 6.11 représentent la *totalité* du multiplet issu de $(n_0 = 24, m_0 = 0, \text{parité paire})$. (a) $\text{Re}\epsilon = -9.8006261 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -3.96 \times 10^{-11}$; (b) $\text{Re}\epsilon = -9.7982349 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -1.899 \times 10^{-10}$; (c) $\text{Re}\epsilon = -9.7956747 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -3.458 \times 10^{-10}$; (d) $\text{Re}\epsilon = -9.7931458 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -3.553 \times 10^{-10}$; (e) $\text{Re}\epsilon = -9.7908629 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -2.852 \times 10^{-10}$, (0.5%); (f) $\text{Re}\epsilon = -9.7885815 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -2.001 \times 10^{-10}$, (1.4%); (g) $\text{Re}\epsilon = -9.7855659 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -1.316 \times 10^{-11}$, (1.8%). (h) $\text{Re}\epsilon = -9.7816878 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -8.02 \times 10^{-11}$, (1.8%).

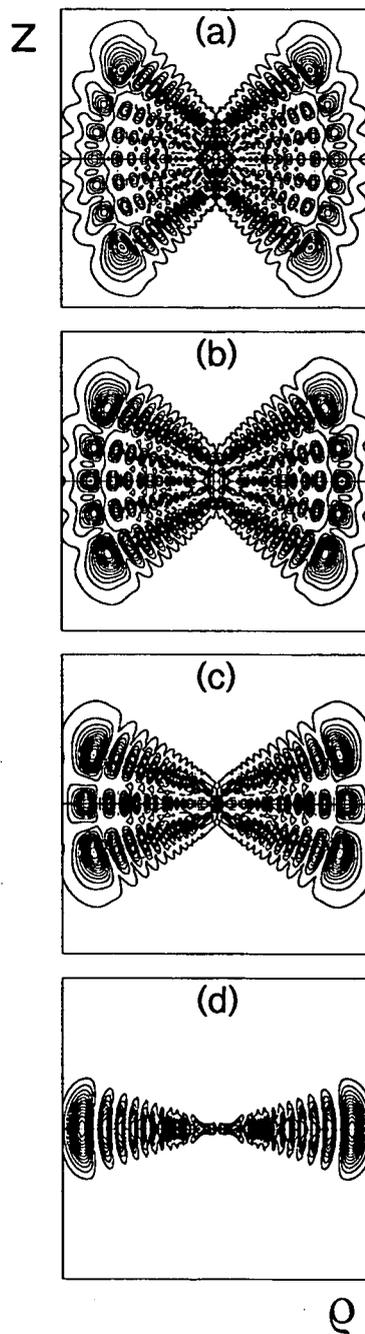


FIG. 6.11 - Suite de la figure 6.10, mêmes échelles. (a) $\text{Re}\epsilon = -9.7769114 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -4.25 \times 10^{-11}$, (1.6%); (b) $\text{Re}\epsilon = -9.7711431 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -1.76 \times 10^{-11}$, (1.1%); (c) $\text{Re}\epsilon = -9.7642816 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -4.5 \times 10^{-12}$, (0.5%); (d) $\text{Re}\epsilon = -9.7562445 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon \simeq -3.3 \times 10^{-13}$.

Partant d'un état "quasi-unidimensionnel" (figure 6.9 (a)) orienté *le long* de l'axe de polarisation du champ de micro-onde et en passant par des états "quasi-isotropes" (figures 6.9 (c) à (e)) on finit par un état "quasi-unidimensionnel" (dans cette représentation en coordonnées cylindriques) qui est maintenant localisé dans le plan *perpendiculaire* au champ. Ce dernier état propre est en fait un "atome plat" (cf. 4.2.2), dont la probabilité électronique est localisée au voisinage d'un disque perpendiculaire à la polarisation du champ extérieur. Il s'agit ici d'un état "*lambda*" presque pur, donc d'un état propre de l'atome hydrogène tel que nous l'avons introduit dans le chapitre 4.2.2.

Tous les états regroupés dans cette figure ont une durée de vie d'au moins *trois ordres de grandeurs plus longue* que le temps d'interaction expérimental de Stony Brook. La décroissance vers le continuum de l'atome plat de la figure 6.9 (g) est même négligeable devant la précision numérique optimale que nous pouvons obtenir dans nos calculs (de l'ordre de 10^{-13}). Une explication possible du faible taux d'ionisation est que la famille d'états que nous montrons ici est issue du multiplet $n_0 = 21$. Ceci correspond à une amplitude réduite légèrement plus petite, $F_0 \simeq 0.0382$ (et $\omega_0 \simeq 0.99$), par rapport à celle vue par les états issus de $n_0 = 23$. Enfin, la largeur des résonances *décroit* systématiquement de (a) à (g), lorsqu'on s'éloigne de l'axe du champ.

Nous terminons cette considération avec les états de Floquet d'un dernier multiplet du spectre, le plus long que nous avons pu trouver, représentés aux figures 6.10 et 6.11. Comme sur les autres figures précédentes, les états propres sont ordonnés par valeur croissante de la partie réelle de la quasiénergie. Pourtant, à part les caractéristiques des densités de probabilités que nous avons déjà observées ci-dessus, la série que nous montrons ici commence avec un état de moment cinétique non nul, c'est-à-dire avec une barrière centrifuge non-triviale. Ceci s'exprime par le fait que la densité de probabilité est proche de zéro au voisinage du noyau, comme on le voit bien sur la figure 6.10 (a). De même dans les deux figures qui suivent, toujours avec un volume de densité zero autour du noyau de plus en plus petit. Comme l'échange d'énergie entre l'électron atomique et la perturbation externe ne peut s'effectuer de manière efficace qu'au voisinage du noyau, une telle décroissance de la densité de probabilité se traduit immédiatement par une décroissance du taux d'ionisation de l'état associé. Par conséquent, la durée de vie des états de la figure 6.10 et 6.11 commence par *décroître* de (a) à (d) par environ un ordre de grandeur, avant de *recroître* de la figure 6.10 (d) à la figure 6.11 (d) par à peu près deux ordres de grandeur. Parmi les douze états de cette série, ce ne sont que les états 5 à 11 qui ont des recouvrements faibles, mais pas tout-à-fait négligeables, avec l'état initial $|n_0 = 23 \ell_0 = 1 m_0 = 0\rangle$. Ceci est dû à l'origine de la série dans le multiplet $n_0 = 24$ (correspondant à une amplitude et pulsation réduite effective de $F_0 \simeq 0.065$ et $\omega_0 \simeq 1.48$) de l'atome non-perturbé, comme on peut le déduire des parties réelles des quasiénergies.

Notons finalement que les douze états des figures 6.10 et 6.11 ne constituent que *la moitié* du multiplet $n_0 = 24$. Ils sont définis par la même valeur de la parité généralisée $\Pi = (-1)^{\ell+K}$ (cf. 4.5). Nous trouvons pourtant *tous* les états

de ce multiplet $n_0 = 24$ dans notre spectre, en considérant les états de l'autre valeur de la parité généralisée. Dans ce cas précis, nous sommes capables de décrire la totalité des états issus de $n_0 = 24$ et non une partie seulement d'entre eux. Les valeurs propres associées montrent une évolution très régulières selon la série, aussi bien dans les parties réelles que dans les parties imaginaires. Ce comportement est visualisé à la figure 6.12.

Les états de Floquet des multiplets $n_0 = 21$ (cf. fig. 6.8) et $n_0 = 24$ (cf. figs. 6.10 à 6.12) donnent la réponse à notre question 2) du début de ce chapitre. La comparaison des figures 6.10 et 6.11 avec la figure 6.12 nous conduit à la conclusion suivante: *A l'intérieur d'un multiplet, les états circulaires inclinés d'un côté, et les états "lambda", de l'autre côté (cf. 4.2.2) sont les états les plus stables dans un champ micro-onde. Leur symétrie est le mieux adaptée à la perturbation de la symétrie Coulombienne par le champ polarisé le long de l'axe \hat{z} , tandis que les états paraboliques extrémaux (cf. 4.2.2) ont une symétrie mal adaptée. Par conséquent, ils ont les plus grandes largeurs. La dernière conclusion, déjà suggérée par la figure 6.10 (d), est évidente à la lumière de la figure 6.9 (a). L'état présenté sur cette figure est un état strictement unidimensionnel, d'orientation le long du champ, et il a la plus grande largeur parmi les membres de son multiplet $n_0 = 21$. De plus, il a un recouvrement d'environ 15% avec l'état parabolique $|n_1 = 20, n_2 = 0, m = 0\rangle$.*

On a donc une corrélation univoque entre la géométrie spatiale et la durée de vie des états de Floquet d'un multiplet bien défini. Une expérience qui permet l'excitation sélective d'un état du multiplet, avec des propriétés d'orientation par rapport au champ bien définies, devrait ainsi permettre de choisir le taux d'ionisation et l'angle d'émission des électrons ionisés.

De tout évidence, les multiplets comme celui des figures 6.10 et 6.11 devraient aussi avoir une signature très nette dans un spectre de photoexcitation des états de Floquet, une expérience qui n'a pourtant pas été entreprise jusqu'ici.

Notons enfin une conséquence importante de nos observations du présent paragraphe pour l'ionisation des états de Rydberg des atomes non-hydrogéoïdes (alcalins) par un champ micro-onde [25, 31, 32, 44, 60]: La présence d'un cœur atomique non Coulombien et des défauts quantiques associés [152] brise la symétrie Coulombienne à l'origine de l'apparition des multiplets des figures 6.8 à 6.11.

L'excitation et l'ionisation des états p du rubidium, par exemple, est essentiellement dominée par les états non-hydrogéoïdes ?? avec $\ell \leq 2$. Par conséquent, le cœur atomique induit une répartition sur les états paraboliques, sphériques et "lambda" extrémaux *a priori très différente* de celle que nous venons de constater pour l'excitation de l'hydrogène, ainsi qu'un chevauchement des différents multiplets bien séparés dans notre cas. Cela pourrait indiquer une explication possible pour les valeurs du seuil d'ionisation des alcalins systématiquement plus basses d'un facteur d'environ cinq par rapport au valeurs obtenues dans l'ionisation d'hydrogène [44].

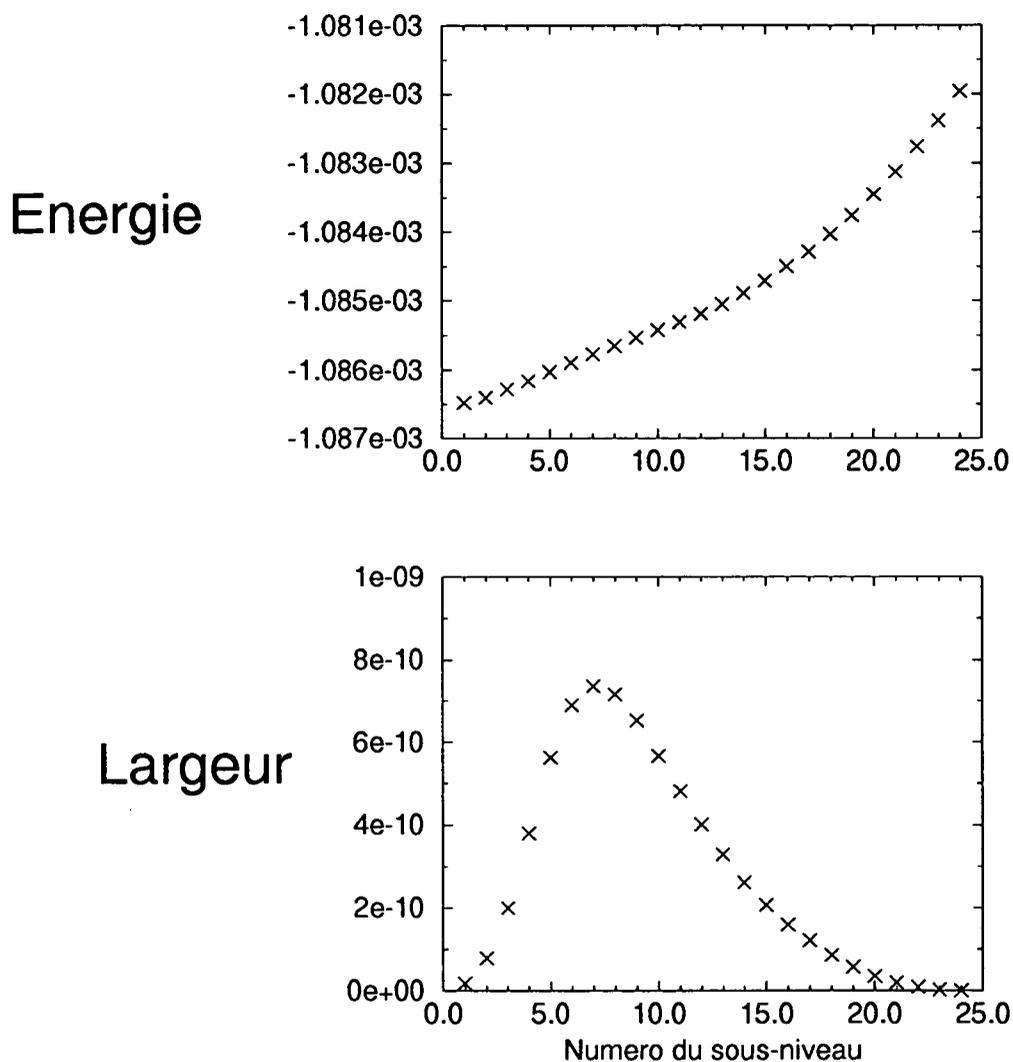


FIG. 6.12 - Energies et largeurs des états de Floquet du multiplet $n_0 = 24$, à $F_0 \simeq 0.0651$, $\omega_0 \simeq 1.48$, selon le nombre du sous-niveau. L'état à plus basse énergie est proche d'un état circulaire incliné (cf. figs. 6.10 (a) et 4.4). L'état de plus grande largeur montre une concentration de la densité électronique le long de l'axe du champ (cf. figs. 6.10 (d) et 4.2). L'état de plus haute énergie représente un "atome plat" (cf. figs. 6.11 (d) et 4.3), avec la plus petite largeur parmi les états du multiplet.

6.2.3 Dynamique temporelle et seuils d'ionisation

Dans les deux paragraphes précédents, nous avons clarifié le lien entre les propriétés géométriques et d'orientation des états de Floquet et leurs largeurs.

Nous allons maintenant étudier la troisième question du début de ce chapitre: dans quelle mesure ces propriétés jouent-elles un rôle pour l'excitation atomique pendant l'ionisation d'un état initial précis, et pour le seuil d'ionisation $F_0(10\%)$ de cet état?

Nous verrons que la réponse à cette question est liée de manière étroite à la décomposition de l'état initial sur la base de Floquet et que cette dernière propriété se manifeste clairement dans la dynamique de l'état ou des états de Floquet dont il est composé.

Dynamique temporelle

Nous avons vu au paragraphe 6.2.1 que l'état $|n_0 = 23 \ell_0 = 1 m_0 = 0\rangle$ se décompose essentiellement sur une quinzaine d'états de Floquet, à $F_0 = 0.0549$ et $\omega_0 = 1.304$, avec des recouvrements entre 1% et 10%.

Un état "typique" des états de Floquet excités pendant l'ionisation de $|23 \ 1 \ 0\rangle$ est celui représenté à la figure 6.8 (d), avec un recouvrement de 4.6% avec l'état initial. La figure 6.13 montre l'évolution temporelle de cet état, pendant une période du champ micro-onde. Tandis que la "géométrie" globale (et en particulier, les directions préférentielles d'ionisation) de la densité reste pratiquement invariant sous le changement de phase ωt , la structure nodale et notamment l'amplitude relative des différents maxima de la densité changent considérablement sur un cycle du champ. Notons aussi que, pour cet état, le flot de probabilité vers le continuum se produit selon la direction *orthogonale* à l'axe de polarisation et que le mouvement le long de cet axe est négligeable devant l'extension de l'état propre le long de cette direction. La structure nodale reflétant l'excitation radiale et angulaire de l'atome ne permet pas l'identification de la dynamique quantique avec un mouvement classique simple. L'ionisation d'un état p ou d'un autre état $|n \ \ell \ m\rangle$ avec des valeurs faibles ou intermédiaires de ℓ (cf. 6.1) est donc marquée par l'excitation d'un *grand nombre* (≥ 10) d'états de Floquet dont la structure nodale est en générale compliquée et exprime un mélange d'états encore plus fort dans la base sphérique (cf. 4.2) de l'atome non perturbé. Cela n'empêche *pas* qu'il y ait, parmi les états de Floquet dominant la dynamique, aussi des états de structure nodale plutôt simple, tels que celui sur la figure 6.8 (f). Pourtant, *aucun* des états ne contribue à la dynamique avec un poids (cf. (4.61)) de beaucoup plus de 10%. Cet aspect de la dynamique se trouve en correspondance étroite avec ce que nous avons constaté pendant notre étude du modèle unidimensionnel de l'atome (cf. 5.7.2), et avec le caractère chaotique de la dynamique classique.

Rappelons que l'état p est un état orienté *le long* de l'axe de polarisation du champ et qu'il partage ainsi une grande parenté avec un état parabolique extrémal tel que nous l'avons introduit au chapitre 4.2.2.

La dynamique de ces derniers est esquissée sur la figure 6.14, à l'exemple de

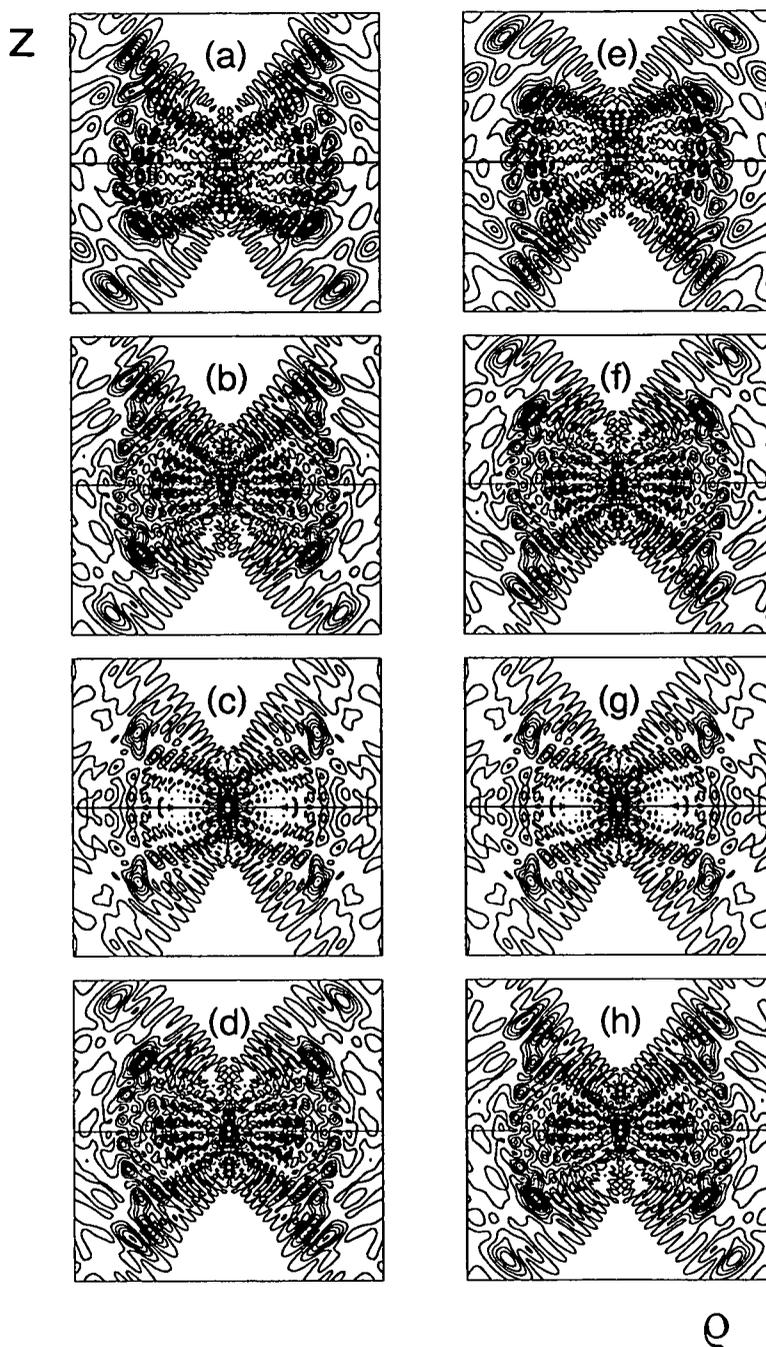


FIG. 6.13 - Evolution temporelle d'un état propre de résonance issu de la variété $n_0 = 23$, à $F_0 = 0.0549$ et à $\omega_0 = 1.304$ (pour $n_0 = 23$), avec $\text{Re}c = -9.4835924 \times 10^{-4}$ et $\text{Im}c = -4.6605 \times 10^{-9}$ (cf. fig. 6.8 (d)). Recouvrement avec l'état $|n_0 = 23 \ell_0 = 1 m_0 = 0\rangle$: 4.6%. Echelles le long des coordonnées cylindriques: $z, \rho = \pm 1300$ a.u.. Phase du champ $\omega t =$ (a) 0, (b) $\frac{\pi}{4}$, (c) $\frac{\pi}{2}$, (d) $\frac{3\pi}{4}$, (e) π , (f) $\frac{5\pi}{4}$, (g) $\frac{3\pi}{2}$, (h) $\frac{7\pi}{4}$.

quatre états propres du spectre, chacun à deux valeurs $\omega t = 0$ et $\omega t = \pi/2$ de la phase du champ. Il s'agit de deux états de Floquet issus des états "lambda" extrémaux $|n_0 = 21 \lambda_0 = 20 m_0 = 0\rangle$ ((a) et (e)) et $|n_0 = 24 \lambda_0 = 23 m_0 = 0\rangle$ ((b), (f)), d'un état propre ((c), (g)) issu de l'état circulaire incliné $|n_0 = 42 \ell_0 = 41 m_0 = 0\rangle$, et finalement d'un état de Floquet ((d), (f)) issu d'un état "lambda" quasi-extrémal $|n_0 = 23 \ell_0 = 21 m_0 = 0\rangle$.

Tous ces états montrent une dynamique quasi régulière sous l'influence du champ externe. La structure nodale reste essentiellement inaffectée pendant l'évolution périodique temporelle et le mouvement principal est celui suivant l'oscillation du champ le long de l'axe \hat{z} . Pourtant, ce mouvement est - aux valeurs typiques de l'amplitude du champ dans le régime micro-onde (cf. 6.3.2) - négligeable devant la taille des atomes. Les états présentés sur cette figure sont donc des états "peu mélangés", dans la base correspondante (sphérique, "lambda") de l'atome non perturbé.

Si l'on préparait un atome dans un tel état initial, qui est *quasiment un état propre du système atome-champ*, cet état aurait le poids primordial (typiquement $\geq 50\%$) dans l'excitation de l'atome et dominerait la dynamique quantique. Globalement, ce poids *croît* avec la pulsation réduite (≥ 1.0), sans être une fonction strictement monotone de ω_0 . L'état représenté dans les figures 6.14 (b) et (f), étant le candidat le plus "pur", a en fait un recouvrement de 96% avec l'état $|n_0 = 24 \lambda_0 = 23 m_0 = 0\rangle$ dont il est issu!

De manière consistante avec nos observations du paragraphe précédent, on trouve que les états sphériques et "lambda" extrémaux ont des largeurs beaucoup plus petites (un à quatre ordres de grandeur) que les états "moins extrémaux" de la même couche d'énergie. Ils sont donc relativement stables vis-à-vis l'ionisation et ne se mélangent pas *bien qu'il n'y aient pas de règles de sélection* qui interdisent a priori de telles transitions ($m_0 = 0$)! Il s'agit là d'un effet purement dynamique, dont la mécanique classique fournit une explication simple (cf. 6.2.3).

La résonance à $\omega_0 = 1$

Le mouvement quasiment libre des états montrés à la figure 6.14 suggère de décrire la dynamique par un modèle emprunté au domaine optique (cf. 2 et 6.3.2), c'est-à-dire au régime haute fréquence $\omega_0 \gg 1$.

L'excursion d'un électron libre dans un champ de laser est donnée par la "quiver length" Q [107]

$$Q = \frac{F_0 n_0^2}{\omega_0^2} = \frac{F}{\omega^2}. \quad (6.2)$$

Comme on ne se trouve pas vraiment dans les conditions $\omega_0 \gg 1$ dans le régime micro-onde, on peut remplacer (6.2) par l'amplitude d'un oscillateur harmonique de pulsation 1 (donc à la fréquence de Kepler de l'électron de Rydberg), couplé à une force périodique de fréquence ω_0 . On obtient

$$Q' = \frac{F_0 n_0^2}{\omega_0^2 - 1}, \quad (6.3)$$

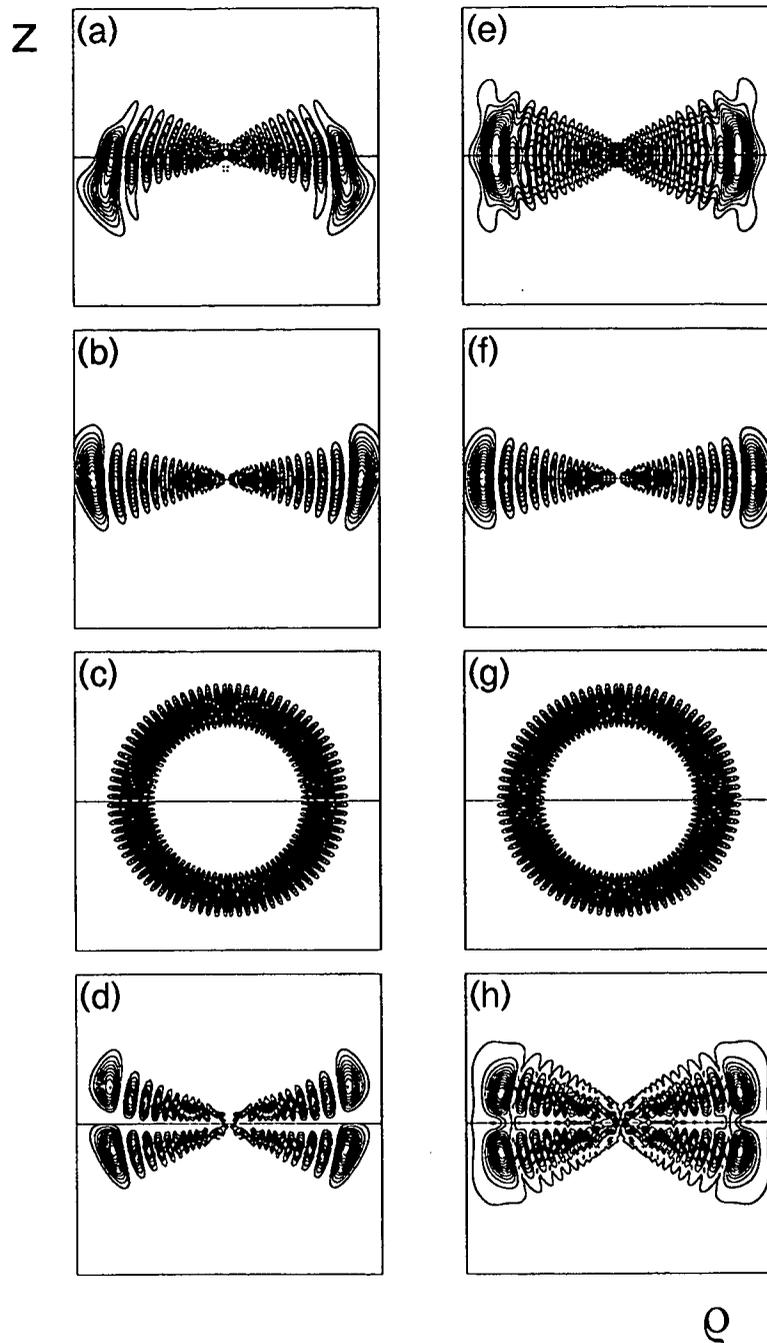


FIG. 6.14 - Densités de probabilité de quelques états propres du spectre de Floquet à $F_0 = 0.0549$ et $\omega_0 = 1.304$ pour $n_0 = 23$, à deux valeurs différentes de la phase ωt de la micro-onde. Colonne de gauche: $\omega t = 0$; colonne de droite: $\omega t = \pi/2$. (a) et (e): état issu de la variété $n_0 = 21$ (figure 6.9 (g)), amplitude et pulsation réduites effectives: $F_0(n_0 = 21) \simeq 0.0382$, $\omega_0(n_0 = 21) \simeq 0.99$. $\rho, z = \pm 950$ a.u.. Notons la forte distorsion de la fonction d'onde induite par la résonance principale à $\omega_0 = 1.0$. (b) et (e): état issu de $|n_0 = 24 \lambda_0 = 23 m_0 = 0\rangle$ (figure 6.11 (d)), $F_0(n_0 = 24) \simeq 0.0651$, $\omega_0(n_0 = 24) \simeq 1.482$. $\rho, z = \pm 1200$ a.u.. (c) et (g): état issu de $|n_0 = 42 \ell_0 = 41 m_0 = 0\rangle$ (figure 6.6 (a)), $F_0(n_0 = 42) \simeq 0.6105$, $\omega_0(n_0 = 42) \simeq 7.94$. $\rho, z = \pm 2800$ a.u.. (d) et (h): état issu de $|n_0 = 23 \lambda_0 = 21 m_0 = 0\rangle$ (figure 6.8 (f)), $F_0 = 0.0549$, $\omega_0 = 1.304$. $\rho, z = \pm 1200$ a.u..

ce qui se transforme en (6.2) dans la limite des hautes fréquences. L'équation (6.3) prend en compte la résonance principale entre champ et atome à $\omega_0 = 1$ et prédit un déphasage de π entre le mouvement de l'électron et l'oscillation du champ au passage à la résonance $\omega_0 = 1.0$.

Les deux aspects peuvent être vérifiés sur la figure 6.14 (a) et (e): L'état de Floquet représenté est celui issu de l'état "lambda" $|n_0 = 21 \lambda_0 = 20 m_0 = 0 \rangle$. A cause de (3.19), cela correspond à une pulsation réduite de $\omega_0 \simeq 0.99 < 1$ vue par l'électron de Rydberg. Comme cette valeur coïncide pratiquement avec la résonance principale, cet état de Floquet est le plus distordu parmi les états propres de cette figure. De plus, on reconnaît une translation nette selon la direction *négative* de l'axe \hat{z} , en opposition avec tous les autres états montrés. Cela est une première indication pour le déphasage entre champ et électron au passage à $\omega_0 = 1$. Nous l'avons vérifié aussi dans d'autres cas.

Le fort couplage entre le champ et l'état "lambda" à $\omega_0 = 1$ se manifeste aussi dans la partie réelle de la valeur propre de cet état: elle est décalée d'environ 1.3×10^{-5} a.u. vers le haut, par rapport à l'énergie de l'état non perturbé. Cette différence correspond à ca. $\omega/10$.

Les autres états représentés à la figure 6.14 ne montrent pratiquement plus de distorsion par le champ. Les pulsations réduites qu'ils voient varient entre 1.304 ((d), (h)) et 7.94 ((c), (g)), les amplitudes réduites entre 0.0549 ((d), (h)) et 0.6105 ((c), (g)). L'impact distorsif de la résonance principale se limite donc à un voisinage relativement étroit de $\omega_0 = 1.0$.

Quatre trajectoires classiques

Dans cette section, nous avons considéré jusqu'ici trois classes d'états initiaux qui semblent fournir "l'ossature" de l'excitation atomique pendant le processus d'ionisation:

- les états circulaires inclinés et
- les états "lambda" extrémaux qui se décomposent sur un très faible nombre ($\ll 10$) d'états de Floquet, situés typiquement aux bords des multiplets n_0 (cf. figs. 6.10 à 6.12) et avec les plus petites largeurs parmi les états d'un multiplet;
- les états orientés le long de l'axe de polarisation \hat{z} du champ (comme les états p) qui ne peuvent être représentés que par un nombre important (> 10) d'états propres du système atome-champ. Cette décomposition implique typiquement quelques multiplets voisins et notamment les états propres avec la plus courte durée de vie parmi un multiplet. Bien que nous n'ayons étudié jusqu'ici qu'un état p (cf. 6.1), strictement les mêmes observations s'appliquent aux états paraboliques extrémaux (cf. 4.2.2 et 6.2.4).

Comme un mélange des états circulaires inclinés et plats dans une base non perturbée (sphérique, "lambda") et ainsi dans la base de Floquet n'est a priori

pas prohibé par des règles de sélection quelconques ($m_0 = 0$), c'est plutôt un raisonnement semiclassique qui est suggéré par la dynamique de ces états.

En fait, une première analyse préliminaire de la dynamique classique de l'atome tridimensionnel dans le champ micro-onde au voisinage de $\omega_0 = 1.0$ a donné le résultat suivant:

- Les trajectoires *perpendiculaires* à l'axe de polarisation \hat{z} du champ sont *stables*. Pourtant, nous n'avons pas trouvés d'orbites périodiques (simples), ce qui laisse des questions ouvertes sur la nature précise du mouvement classique.
- Les trajectoires circulaires dans le plan contenant l'axe de polarisation \hat{z} du champ sont des orbites périodiques *stables*.
- Les trajectoires le long du champ sont
 1. stables le long du champ et légèrement instables (exposant de Lyapunov $\simeq 0.04$) selon la direction ρ orthogonale à \hat{z} , si le mouvement est *en phase* avec le champ;
 2. *fortement instables* (exposant de Lyapunov $\simeq 1.1$) le long de \hat{z} et légèrement instable selon la direction orthogonale (exposant de Lyapunov $\simeq 0.04$), si le mouvement est en opposition de phase par rapport au champ.

Les figures 6.15 à 6.18 montrent quatre trajectoires classiques obtenues pour les mêmes valeurs physiques de la pulsation et de l'amplitude du champ que le spectre de Floquet que nous avons étudié dans les paragraphes précédents.

Notons la parenté immédiate entre la trajectoire d'orientation perpendiculaire au champ (fig. 6.16) et, par exemple, l'état de Floquet issu de $|n_0 = 24 \lambda_0 = 21 m_0 = 0\rangle$ sur la figure 6.11 (c). De même la similarité entre la trajectoire circulaire (fig. 6.15) et l'état circulaire incliné de la figure 6.14 (c), et celle de la trajectoire le long et en phase avec le champ (fig. 6.17) avec les états de Floquet sur les figures 6.10 (c) à (e).

Comme les trajectoires stables (figs. 6.15 et 6.16) correspondent à des régions stables (cernées par des tores; cf. 1.1.2 et 3.3) dans l'espace des phases, on peut s'attendre à l'existence d'états propres du système quantique correspondant, par une quantification EBK du mouvement classique [134]. Nous conjecturons qu'il s'agit exactement des états de Floquet issus des états "lambda" ou circulaires inclinés que nous avons rencontrés aux derniers paragraphes.

Il reste les trajectoires classiques le long de l'axe \hat{z} (figs. 6.17 et 6.18) qui sont au moins légèrement instables selon les directions angulaires. Elles semblent représenter la région instable de l'espace des phases.

Notons finalement une différence importante entre les états plats et les états circulaires inclinés: déjà l'image classique montre que la géométrie des derniers implique une collision de l'électron avec le noyau, pour des valeurs suffisamment élevées de l'amplitude de la perturbation.

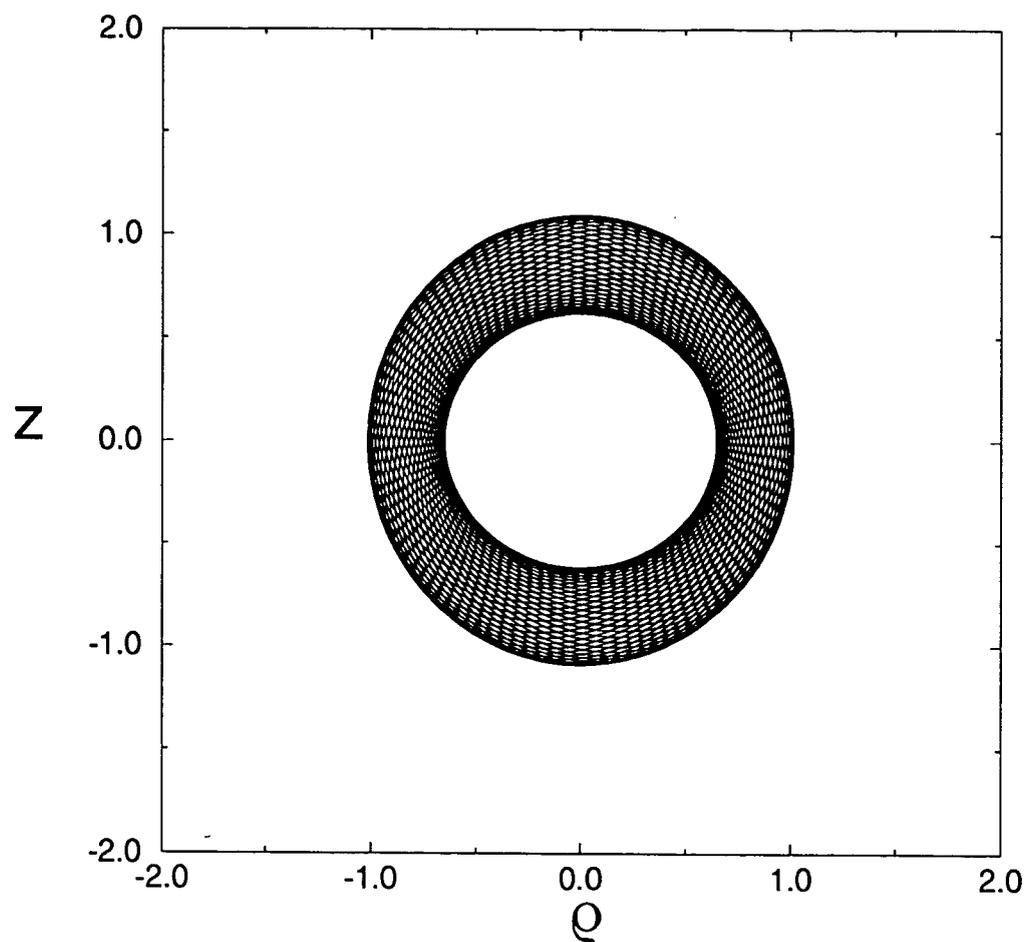


FIG. 6.15 - Trajectoire classique correspondant à un état de Floquet issu d'un état circulaire incliné $|n_0 \ell_0 = n_0 - 1 \ m_0 = 0 \rangle$. $\omega \simeq 1.07175 \times 10^{-4}$ a.u., $F \simeq 1.96 \times 10^{-7}$ a.u. (cf. l'état de Floquet sur la figure 6.14 (c)). La trajectoire quasi-circulaire est stable.

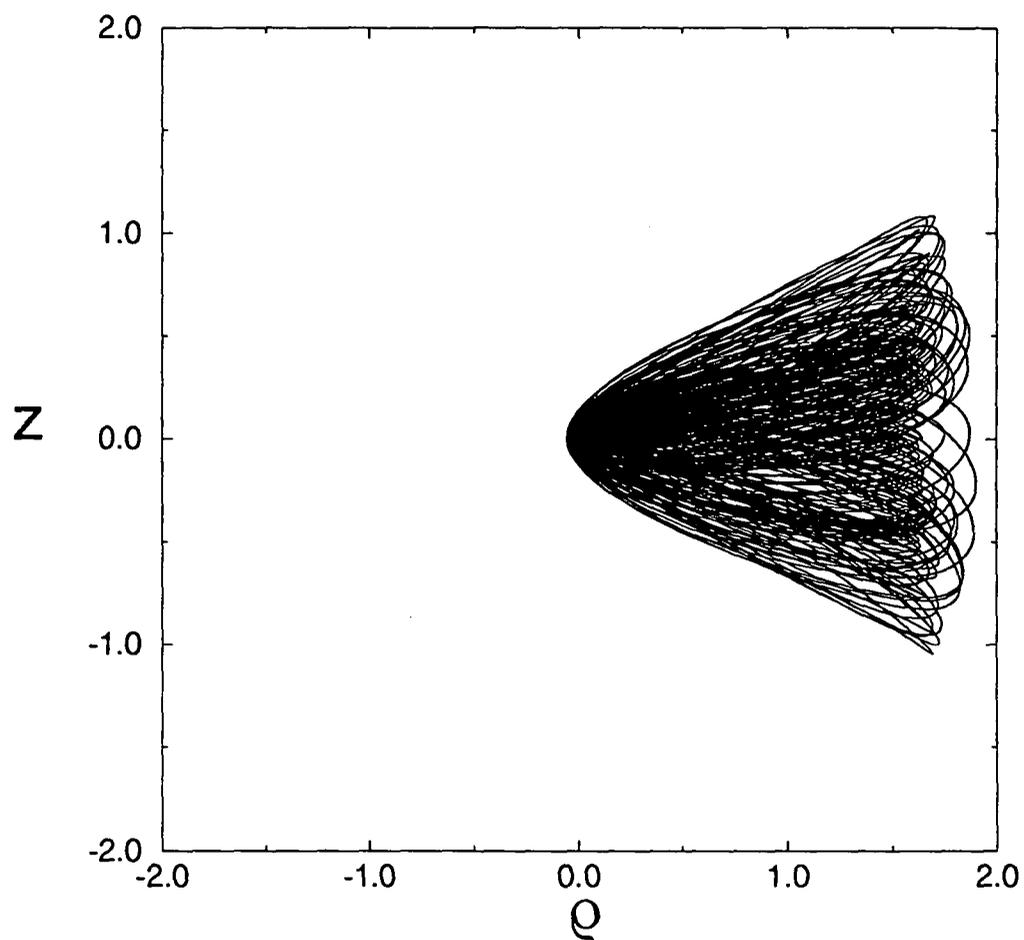


FIG. 6.16 - Trajectoire classique correspondant à un état de Floquet issu d'un état "lambda" $|n_0 \lambda m_0 = 0\rangle$. $\omega \simeq 1.07175 \times 10^{-4}$ a.u., $F \simeq 1.96 \times 10^{-7}$ a.u. (cf. l'état de Floquet sur la figure 6.11 (c)). Le mouvement proche du plan $z = 0$ est donc stable.

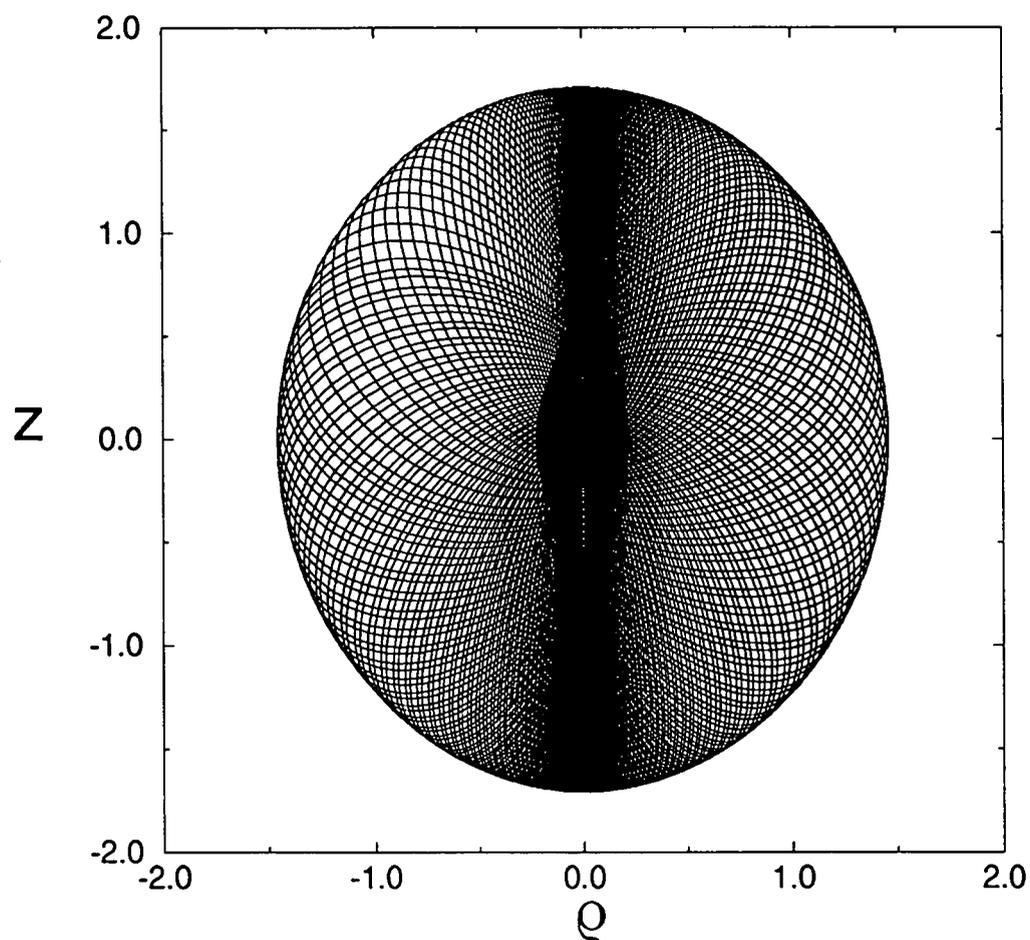


FIG. 6.17 - Trajectoire classique avec un condition initiale le long de l'axe \hat{z} et en phase avec le champ. Elle est stable selon \hat{z} et légèrement instable (exposant de Lyapunov $\simeq 0.04$) selon la direction orthogonale (cf. les états de Floquet sur les figs. 6.10 (c) à (e)). $\omega \simeq 1.07175 \times 10^{-4}$ a.u., $F \simeq 1.96 \times 10^{-7}$ a.u..

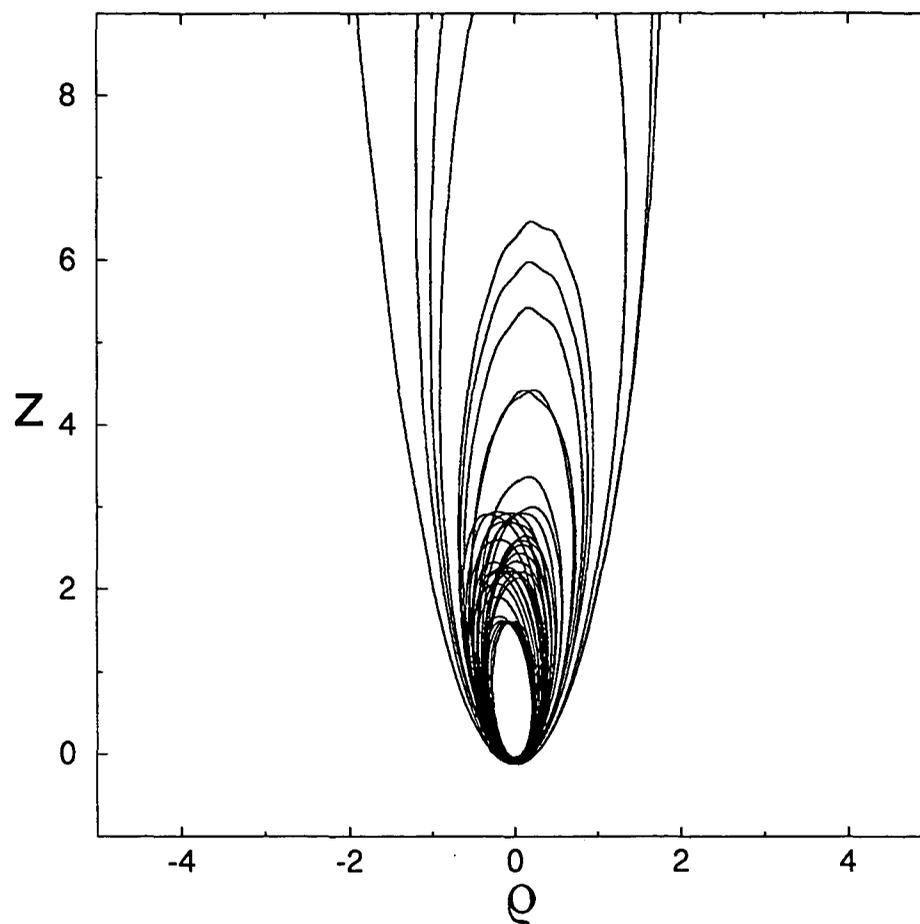


FIG. 6.18 - Trajectoire classique avec un condition initiale le long de l'axe \hat{z} et en opposition de phase avec le champ. Elle est très instable selon \hat{z} (exposant de Lyapunov $\simeq 1.1$) et légèrement instable (exposant de Lyapunov $\simeq 0.04$) selon la direction orthogonale (cf. 6.2.4).

On peut obtenir une estimation de cette amplitude à partir de l'équation (6.3) pour l'excursion de l'électron dans le champ oscillant qui ne doit donc pas dépasser le diamètre de la trajectoire circulaire. Après, le mouvement classique devient irrégulier [76], ce qui se manifeste d'ailleurs aussi dans les calculs quantiques: les états circulaires inclinés sont les états les plus difficiles à traiter numériquement, au voisinage du seuil d'ionisation. Il n'existe pas de telle limitation géométrique pour les atomes plats!

L'état circulaire $|n_0 \ell_0 = n_0 - 1 m_0 = n_0 - 1 \rangle$

On peut, enfin, préparer l'électron de Rydberg dans un état initial circulaire (non incliné) qui ne correspond pas seulement à une dynamique classique stable mais qui implique, en plus, une densité d'états fortement réduite. Le nombre de canaux d'excitation accessibles à l'électron est donc beaucoup plus petit que dans les cas que nous avons considérés jusqu'ici.

Il s'agit de l'état circulaire $|n_0 = 23 \ell_0 = 22 m_0 = 22 \rangle$ (cf. fig. 4.5) dont le plan est *perpendiculaire* à l'axe \hat{z} du champ micro-onde.

La figure 6.19 en montre la densité électronique à une amplitude et une pulsation réduites du champ micro-onde de $F_0 = 0.19$ et $\omega_0 = 1.304$, respectivement. L'excursion maximale de la densité électronique le long du champ que nous observons sur la figure (a) et (d) est d'environ 100 a.u., une valeur assez proche de celle prédite par l'équation (6.3), $Q \simeq 144$ a.u.. Comme nous avons déjà remarqué pour les états "lambda" et les états circulaires inclinés (cf. fig. 6.14), l'état de Floquet issu de l'état circulaire n'est que faiblement distordu par rapport à l'état initial non perturbé. La distance radiale de la densité électronique au noyau est pratiquement exactement celle de l'atome non-perturbé: $n_0^2 = 529$ a.u..

L'amplitude du champ sur cette figure correspond au seuil $F_0(10\%)$ de cet état, qui est d'un facteur environ 3.5 plus élevé que le seuil $F_0 = 0.0549$ que nous avons trouvé pour l'ionisation de $|n_0 = 23 \ell_0 = 1 m_0 = 0 \rangle$! Comme prévu, la projection de l'état de Floquet issu de l'état circulaire $n_0 = 23$ non-perturbé sur l'état initial vaut 66%. Il n'y a à cette valeur de l'amplitude qu'un seul autre état du spectre qui a un recouvrement de 21% avec l'état initial, tous les autres états ayant un poids en-dessous de 10%. Comme les états circulaires inclinés et plats, l'état issu de l'état circulaire domine largement la dynamique pendant l'excitation atomique et montre un taux d'ionisation relativement faible.

En analysant la dépendance de la décomposition de $|23 22 22 \rangle$ sur la base de Floquet sur l'intervalle $\omega_0 \in [0.608; 2.5]$ de la pulsation réduite (pour chaque valeur de ω_0 à l'amplitude correspondant au seuil $F_0(10\%)$) nous obtenons les résultats résumés dans le tableau 6.1.

De manière générale on trouve une résonance avec un poids (4.61) proche de ou supérieur de 50% et le caractère largement plus "régulier" de la dynamique quantique par rapport à celle des états (quasi)unidimensionnels orientés le long de \hat{z} n'est pas affecté, par ce faible élargissement dans la base de Floquet. L'équidistribution de l'état initial sur trois états de Floquet à $\omega_0 = 1.18$ s'explique par un large anticroisement de l'état circulaire avec des états voisins, justement à

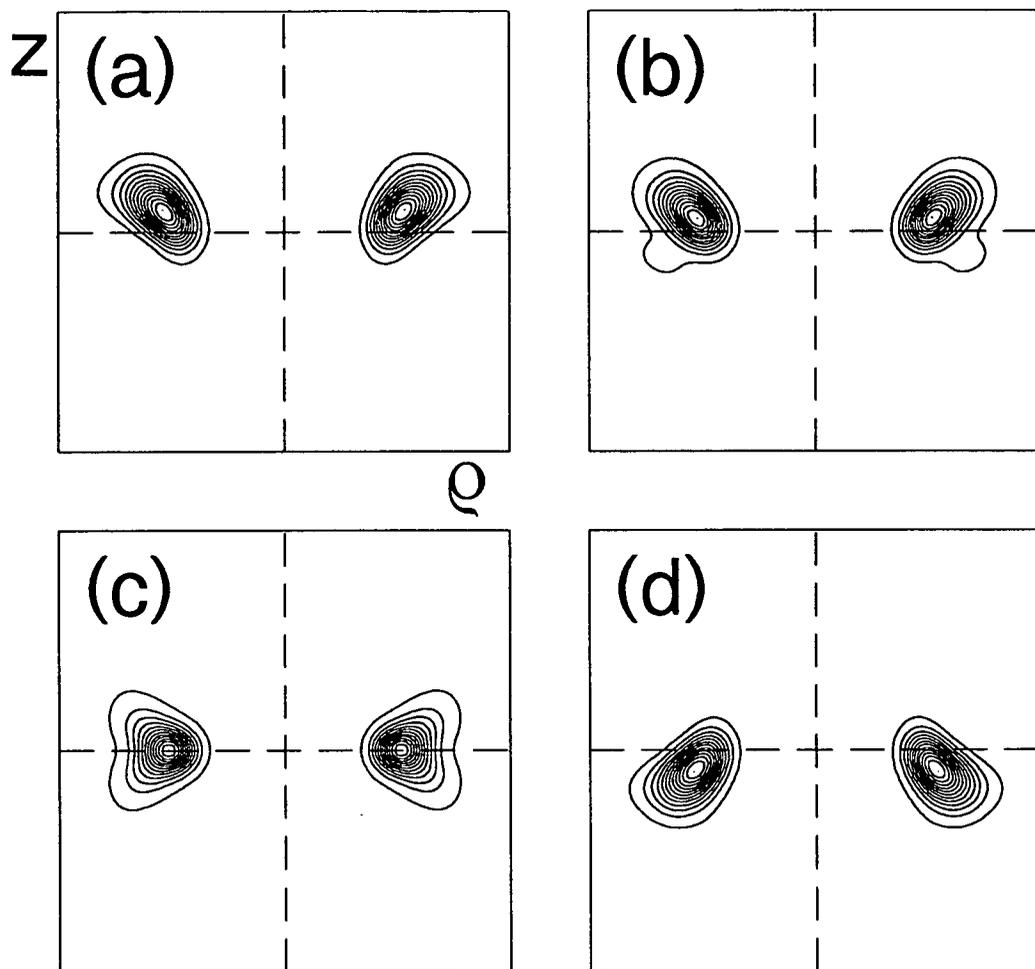


FIG. 6.19 - Densité électronique de l'état de Floquet dominant la dynamique de l'état circulaire $|n_0 = 23 \ell_0 = 22 m_0 = 22\rangle$ dans un champ d'amplitude et de pulsation réduite $F_0 = 0.19$, $\omega_0 = 1.304$, en coordonnées cylindriques ($z, \rho = \pm 1000$ a.u.) et pour différentes valeurs de la phase de la perturbation. $\omega t =$ (a) 0, (b) $\frac{\pi}{4}$, (c) $\frac{\pi}{2}$, (d) π .

ω_0	Nombre d'états de Floquet avec un recouvrement de plus de 10% avec $ 23\ 22\ 22\rangle$	Recouvrements avec $ 23\ 22\ 22\rangle$
0.608	1	78%
0.8	2	22%, 56%
1.0	3	17%, 28%, 49%
1.18	3	28%, 28%, 30%
1.304	2	21%, 66%
1.43	1	73%
1.6	2	13%, 68%
1.8	2	27%, 66%
1.9	1	74%
2.0	1	78%
2.1	1	82%
2.3	1	86%
2.5	2	35%, 60%

TAB. 6.1 - Décomposition de l'état circulaire $|n_0 = 23\ \ell_0 = 22\ m_0 = 22\rangle$ sur la base de Floquet à $F_0 = 0.19$, en fonction de ω_0 . On ne considère que les états propres ayant un recouvrement de plus de 10% avec $|23\ 22\ 22\rangle$.

la valeur $F_0(10\%) = 0.146$ du seuil d'ionisation. On peut supposer que le faible élargissement de l'état initial dans la base de Floquet au voisinage de $\omega_0 = 1.0$ est du au couplage important au voisinage de la résonance principale (cf. fig. 6.14 (a), (e)).

Seuils d'ionisation

On a vu que les largeurs des résonances issues des états sphériques et "lambda" extrémaux ainsi que de l'état circulaire sont systématiquement plus petites (par quelques ordres de grandeur) que celles des états de Floquet issus des états (quasi)unidimensionnels. Pour $|n_0 = 23\ \ell_0 = 22\ m_0 = 22\rangle$ et $\omega_0 = 1.304$, nous avons déjà constaté que cela se traduit par une augmentation du seuil d'ionisation d'un facteur environ 3.5 par rapport au cas (quasi)unidimensionnel. La figure 6.20 résume les résultats d'une comparaison systématique du seuil de l'état circulaire avec celui de l'état $23\ p$ (cf. fig. 6.3). En plus des résultats obtenus par une projection diabatique (cercles pleins) de la fonction d'onde sur la base de Floquet, nous indiquons aussi le seuil correspondant à une population adiabatique (triangles pleins) à partir de l'état circulaire, pour cinq valeurs différentes de la pulsation réduite. Les cercles ouverts indiquent quelques seuils pour un état initial circulaire incliné $|n_0 = 23\ \ell_0 = 22\ m_0 = 0\rangle$, les croix quelques-uns pour l'atome plat $|n_0 = 23\ \lambda_0 = 22\ m_0 = 0\rangle$.

L'écart entre le seuil des atomes (quasi)unidimensionnels orientés le long du champ et celui des états extrémaux ou circulaires est net voire éclatant et aug-

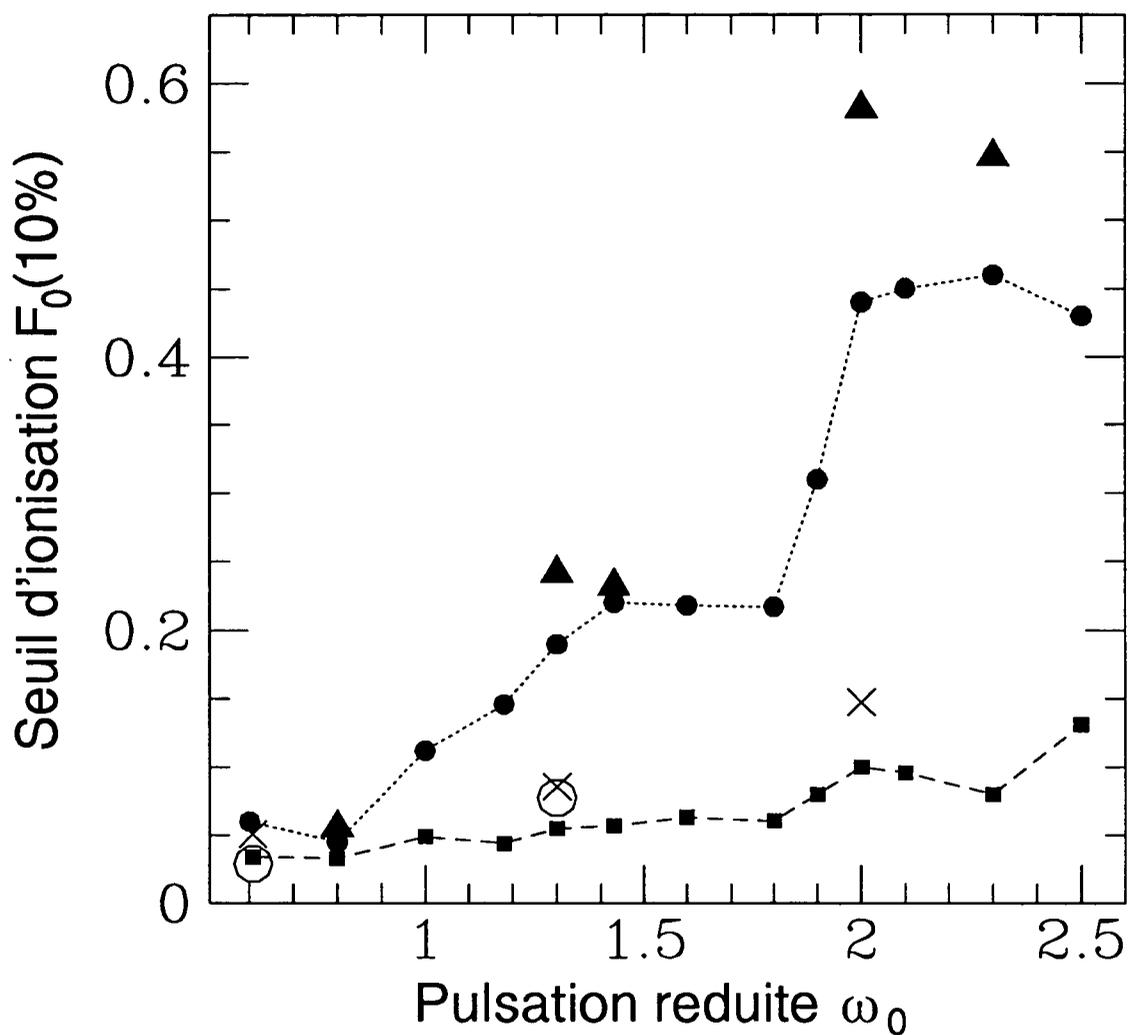


FIG. 6.20 - Seuil d'ionisation $F_0(10\%)$ de l'état circulaire $|n_0 = 23 \ell_0 = 22 m_0 = 22 \rangle$ (cercles pleins) dans un champ micro-onde, en comparaison avec le seuil de l'état $|n_0 = 23 \ell_0 = 22 m_0 = 22 \rangle$ (carrés pleins), et avec quelques seuils de l'état "lambda" $|n_0 = 23 \lambda_0 = 22 m_0 = 0 \rangle$ (croix) et l'état $|n_0 = 23 \ell_0 = 22 m_0 = 0 \rangle$ (cercles ouverts). Les triangles pleins indiquent le seuil de l'état circulaire pour une population adiabatique de l'état de Floquet principal.

mente entre $\omega_0 = 0.8$ et $\omega_0 = 2.3$ jusqu'à un facteur voisin de six. Les états plats et l'état $|n_0 = 23 \ell_0 = 22 m_0 = 0\rangle$ montrent un comportement distinctement intermédiaire entre le circulaire et l'état $23p$.

Quant à la différence entre les limites diabatique et adiabatique de l'ionisation de l'état circulaire, nous voyons qu'elle est plutôt faible. La dépendance globale de $F_0(10\%)$ avec la pulsation réduite n'en est pas affectée. Notons aussi que l'état plat est presque aussi stable que l'état circulaire à $\omega_0 = 0.608$, tandis que l'état circulaire incliné est *moins stable que l'état p*, à cette pulsation réduite.

En somme, la dynamique "régulière" des états extrémaux dans un champ de micro-onde se manifeste massivement dans leur stabilité vis-à-vis de l'ionisation par un champ micro-onde. Cette dynamique "régulière" exclut d'ailleurs une interprétation de la stabilité accrue par un argument de type localisation dynamique [7]: Ce dernier est fondé sur l'interférence destructive des amplitudes de probabilité le long des différents canaux vers le continuum. On présume ainsi un élargissement non-négligeable de la dynamique aussi bien sur la base des états liés que des états de Floquet. Comme nous n'avons ici qu'au maximum trois états (cf. tableau 6.1) qui génèrent essentiellement toute la dynamique quantique, l'effet de localisation quantique à observer devient trivial. L'échelle de temps sur laquelle se joue l'élargissement de la distribution de probabilité classique dans l'espace des phases est beaucoup plus longue que l'échelle de temps induite par la densité d'états effective, fortement réduite dans un tel cas.

Ainsi, parler d'une éventuelle "suppression" d'une ionisation classiquement chaotique par la mécanique quantique n'a plus de sens. Les deux échelles de temps caractérisant la diffusion classique et la nature discrète du spectre quantique (en négligeant ici l'échelle de temps caractérisant le couplage au continuum qui est beaucoup plus longue que les deux autres) sont complètement séparées.

Cette remarque nous semble pertinente sur tout l'intervalle de la pulsation couvert par la figure 6.20, bien que tous les états exhibent essentiellement le même seuil à la valeur $\omega_0 = 0.8$, où le couplage entre champ et atome est le plus efficace, indépendamment de l'état initial.

6.2.4 Les cicatrices de l'atome tridimensionnel

Nous savons maintenant que l'excitation atomique pendant l'ionisation par un champ micro-onde peut être essentiellement décrite par le poids relatif des états extrémaux des bases sphériques, paraboliques et "lambda" (cf. 4.2.2). Nous avons vu au dernier paragraphe que les états circulaires inclinés, et encore plus les atomes plats, sont - en très bonne approximation - des états propres du système atome-champ. En revanche, nous avons constaté que les états orientés le long du champ ne peuvent être décrits que par un nombre important d'états de Floquet.

Dans le spectre de Floquet que nous avons étudié jusqu'ici, nous avons trouvé quatre types d'états propres qui suggèrent un analogue du mouvement classique:

- L'état "lambda" extrémal, tel que par exemple celui de la figure 6.9 (g), dont nous avons reproduit la surface et les contours de la densité électronique (moyennée sur une période du champ) sur la figure 6.21;

- l'état unidimensionnel le long de l'axe \hat{z} (fig. 6.9 (a)), dont on trouve la surface et les contours de la densité électronique (moyennée sur une période du champ) sur la figure 6.22;
- deux états d'allure "classique" similaire, dont les surfaces et contours des densités électroniques (moyennées sur une période du champ) sont portées sur les figures 6.23 et 6.26 ((a) et (b));
- les états circulaires inclinés des figures 6.6 (a) et 6.7 (g).

Au dernier paragraphe nous avons vu que seulement le dernier type possède une orbite périodique simple comme analogue classique (cf. fig. 6.15). L'atome plat (fig. 6.21) a un homologue classique, mais semble-t-il sans orbite périodique (cf. 6.16). Enfin, pour l'état unidimensionnel le long du champ (fig. 6.22) et pour le type d'états propres représenté sur les figures 6.23 et 6.26, nous n'avons pas trouvé d'analogue classique qui soit restreint sur la même région de l'espace de configuration.

Ces deux derniers types représentent en fait les bons candidats pour une cicatrice de l'atome tridimensionnel le long d'une orbite périodique instable.

Etudions d'abord la dynamique temporelle de l'état unidimensionnel le long de \hat{z} .

La figure 6.24 montre son évolution temporelle, sur une période entière de la perturbation. On voit très bien que l'on a en fait deux trajectoires classiques qui supportent la probabilité quantique de l'état propre stationnaire. Il y a une trajectoire sur laquelle l'électron classique se trouve à la distance maximale du noyau à phase zéro du champ ($z \leq 0$, en phase), tandis qu'il est le plus proche du noyau sur l'autre trajectoire ($z \geq 0$, en phase opposée), au même instant. Il est instructif de comparer cette figure aux figures 5.31, 5.32, 5.37 et 5.38 de la section 5.7.2 du chapitre précédent, qui montrent les homologues du modèle unidimensionnel de l'état "quasi-unidimensionnel" présenté ci-dessus.

Comme nous avons vu au paragraphe précédent (figs. 6.17 et 6.18), des résultats d'une analyse de la dynamique classique de l'atome tridimensionnel montrent que dans ce cas, les *deux* trajectoires sont instables. Pourtant, la trajectoire correspondante à la résonance centrale du modèle 1D (figs. 5.31,5.32) n'est que faiblement instable perpendiculairement à la polarisation du champ et stable (comme elle doit l'être) le long de cette direction. En revanche, la trajectoire correspondant au point hyperbolique principal de la section de Poincaré du modèle unidimensionnel (cf. figs. 5.37 et 5.38) est fortement instable le long de l'axe du champ et faiblement instable, comme la première, dans le plan perpendiculaire. Néanmoins, même la faible instabilité des trajectoires classiques serait suffisante pour ioniser l'électron atomique pendant le temps expérimental. Cet état étant en fait très stable, l'explication doit être d'origine quantique plutôt que classique.

En tout état de cause, l'état représenté sur la figure 6.22 est une cicatrice (cf. 1.1.2, 3.3). Nous avons déjà remarqué pendant notre discussion du modèle unidimensionnel que la population de cet état en tant que cicatrice ne peut pas servir comme explication de la "stabilité anormale" des expériences de Koch et al.

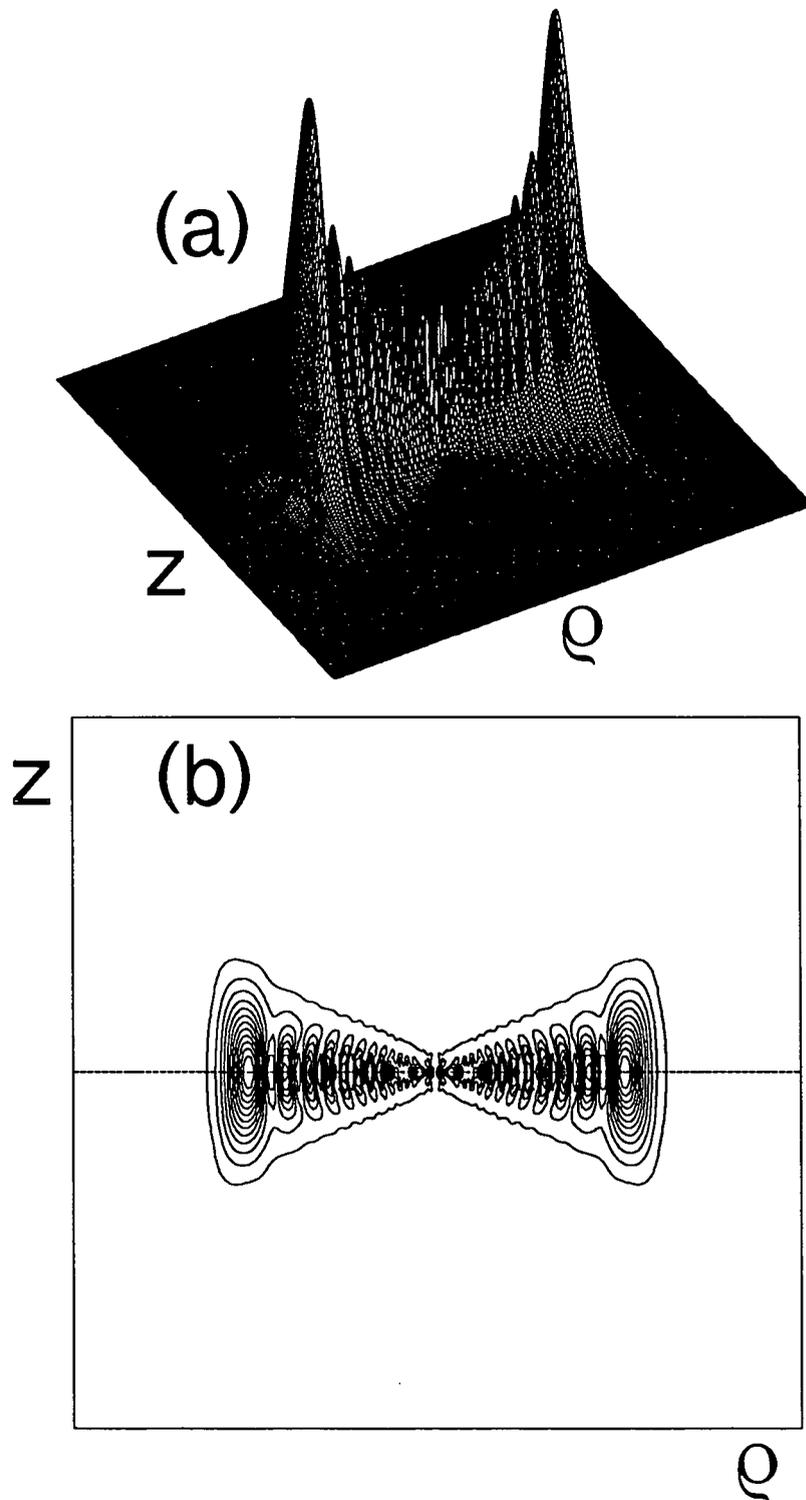


FIG. 6.21 - (a) Surface et (b) contours de la densité électronique moyennée sur une période du champ de micro-onde de l'état de Floquet issu de l'état "lambda" $|n_0 = 21 \lambda_0 = 20 m_0 = 0 \rangle$, à $F_0 = 0.0549$, $\omega_0 = 1.304$ (pour $n_0 = 23$). $z, \rho = \pm 1400$ a.u.. Voir aussi la figure 6.9 (g).

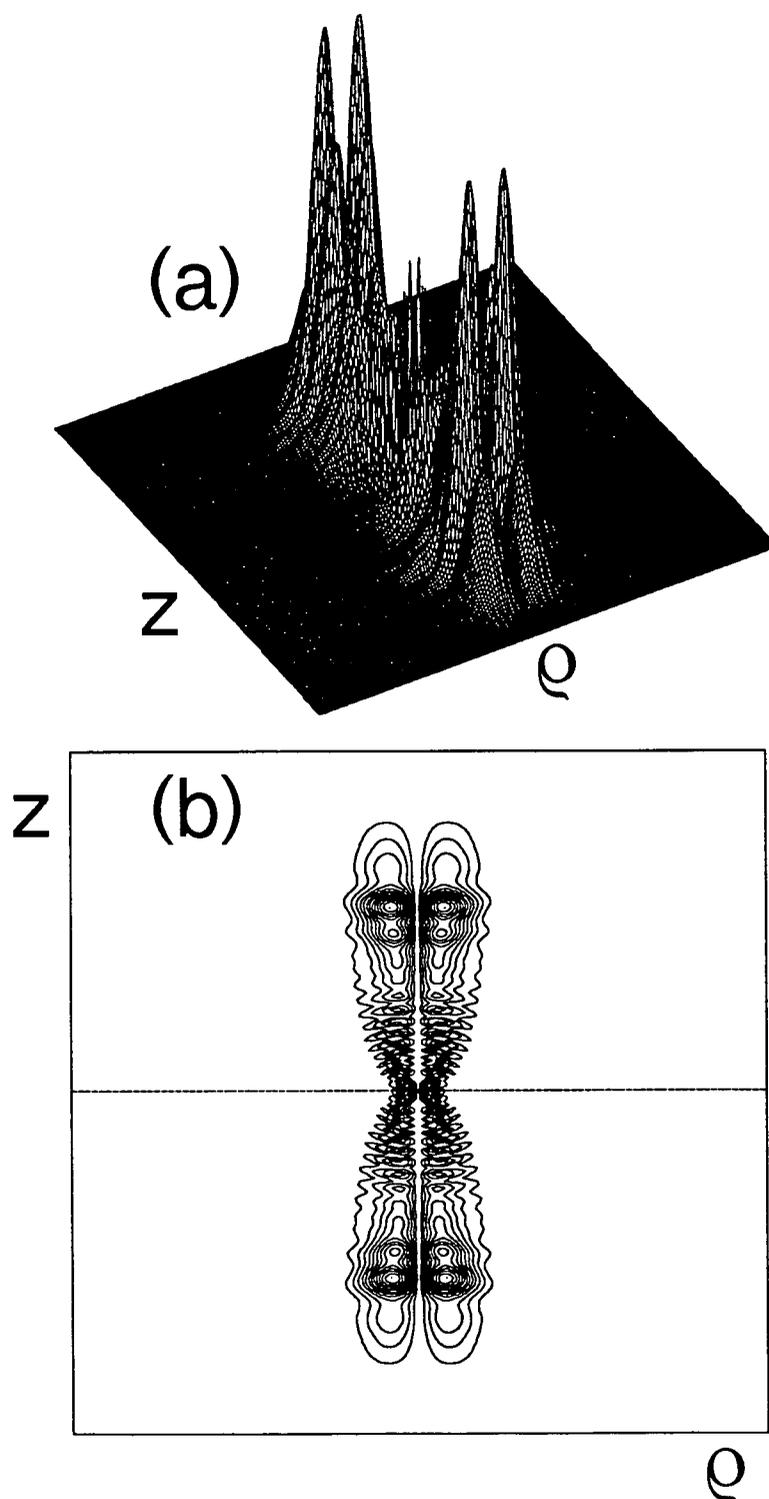


FIG. 6.22 - Moyenne de la densité électronique de la résonance “quasi-unidimensionnelle” à $F_0 = 0.0549$ et $\omega_0 = 1.304$ (pour $n_0 = 23$) (voir aussi la figure 6.9 (a)). $z, \rho = \pm 1400$ a.u.. Recouvrement (adiabatique) avec l'état parabolique $|n_1 = 20 \ n_2 = 0 \ m_0 = 0 \rangle$ ($\omega_0 \simeq 0.99$) égal à environ 15%, avec $|n_1 = 22 \ n_2 = 0 \ m_0 = 0 \rangle$ ($\omega_0 \simeq 1.304$) égal à environ 8%, avec $|n_1 = 23 \ n_2 = 0 \ m_0 = 0 \rangle$ ($\omega_0 \simeq 1.48$) égal à environ 1%. Recouvrement (adiabatique) avec l'état p $|n_0 = 21 \ l_0 = 1 \ m_0 = 0 \rangle$ ($\omega_0 \simeq 0.99$) égal à environ 4%, avec $|n_0 = 23 \ l_0 = 1 \ m_0 = 0 \rangle$ ($\omega_0 \simeq 1.304$) égal à environ 1.5%, avec $|n_0 = 24 \ l_0 = 1 \ m_0 = 0 \rangle$ ($\omega_0 \simeq 1.48$) $< 1\%$.

[10, 28], car le fait que la fonction d'onde montre une cicatrice n'est pas suffisant pour impliquer une largeur suffisamment petite de la résonance. Pourtant, on peut s'intéresser à l'état initial qui permettrait le mieux d'exciter une telle fonction d'onde, afin de faciliter l'identification non ambiguë de certaines structures dans le signal d'ionisation avec un état propre de Floquet. La forme des lignes nodales de l'état, notamment sur les figures 6.24 (b), (d), (f) et (h) suggère un recouvrement important de la cicatrice avec un état parabolique extrémal $|n_1 = n_0 - 1, n_2 = 0, m_0 = 0\rangle$ (cf. fig. 4.2). Nous avons testé cette conjecture en projetant la résonance sur l'état $|n_1 = 22, n_2 = 0, m_0 = 0\rangle$. Le résultat de ce calcul est satisfaisant: alors que le recouvrement de la cicatrice avec l'état $|n_0 = 23, \ell_0 = 1, m_0 = 0\rangle$ est de 1.5%, celui avec l'état parabolique $|n_1 = 22, n_2 = 0, m_0 = 0\rangle$ (ainsi qu'avec $|n_1 = 0, n_2 = 22, m_0 = 0\rangle$) remonte à presque 8%. De plus, partant de l'état $23 p$ il y a plus d'une dizaine d'états propres ayant un recouvrement plus important avec l'état initial que la résonance "quasi-unidimensionnelle" à laquelle nous nous intéressons ici. En revanche, partant d'un état parabolique extrémal avec $n_0 = 23$, c'est *précisément cet état* propre de Floquet qui a le recouvrement le plus grand avec l'état initial. Néanmoins, nous observons dans les deux cas d'un état initial "quasi-unidimensionnel" l'élargissement caractéristique de la dynamique quantique sur la base de Floquet que nous avons déjà discuté précédemment.

Comme nous avons constaté dans la section précédente, la cicatrice est l'état de Floquet issu du multiplet $n_0 = 21$ de l'atome non-perturbé. Elle voit ainsi une pulsation réduite effective de $\omega_0 \simeq 0.99$ et peut alors être identifiée avec la résonance principale, comme nous l'avons déjà fait ci-dessus à cause de son évolution temporelle. Projetant cet état sur l'état parabolique extrémal correspondant à $n_0 = 21$, c'est-à-dire sur l'état $|n_1 = 20, n_2 = 0, m_0 = 0\rangle$, on trouve par conséquent un recouvrement encore plus important qu'avec $|n_1 = 22, n_2 = 0, m_0 = 0\rangle$, d'une valeur d'environ 15% et toujours largement dominant parmi les autres états du spectre. Le recouvrement avec l'état $21 p$ est encore beaucoup plus petit, d'une valeur d'environ 4%. La résonance centrale a ainsi une extension de $\omega_0 \leq 0.99$ à $\omega_0 \simeq 1.304$, tandis qu'au-delà de cet intervalle, la cicatrice associée ne domine plus la dynamique. Nous trouvons un recouvrement de l'état de Floquet des figures 6.22 et 6.24 avec $|n_1 = 23, n_2 = 0, m_0 = 0\rangle$ d'environ 1% (avec $|n_0 = 24, \ell_0 = 1, m_0 = 0\rangle$ moins de 1%). A cette pulsation réduite $\omega_0 \simeq 1.48$, il y a en fait d'autres états comparables à ceux représentés dans les figures 6.10 (d) à (f) qui dominent la dynamique de l'état dans le champ externe.

Une expérience telle qu'elle a été montée par Bayfield et al. [8] devrait donc exciter la cicatrice de manière beaucoup plus efficace et non ambiguë qu'une expérience qui ne peut spécifier que le nombre quantique principal de l'état initial, notamment dans l'intervalle $\omega_0 \in [1.0; 1.304]$ de la pulsation réduite [132]. En revanche, les valeurs typiques de $F_0(10\%)$ ne nous semblent pas très différentes pour l'état parabolique et l'état p .

Rappelons enfin la double nature de la cicatrice unidimensionnelle de l'atome réel (cf. fig. 6.22, 6.24) : il "réunit" les caractéristiques de la résonance principale

et du point hyperbolique associé (cf. figs. 5.31, 5.31, 5.37, 5.38) de notre étude de la dynamique unidimensionnelle. Comme sa largeur est de l'ordre de 10^{-12} , il a toujours une durée de vie de l'ordre de $10 \mu\text{s}$. On a ainsi deux paquets d'onde "classiques" *non dispersifs* (comme l'état représenté dans les figures 5.31 et 5.32) peuplés à partir d'un état parabolique extrémal dont la durée de vie est de l'ordre de 10^7 (!) orbites de Kepler de l'électron de Rydberg non perturbé (cf. 5.7.2).

Finissons ce paragraphe avec les états de Floquet représentés sur les figures 6.23 (et 6.26).

Les contours de la figure 6.23 permettent de reconnaître immédiatement une structure nodale de la fonction d'onde qui rappelle deux ellipses d'orientation inverse avec le grand axe parallèle à la polarisation du champ et le foyer au noyau. C'est la représentation 3D (cf. fig. 6.23) de la densité de probabilité qui permet d'apprécier le degré de localisation de l'état de Floquet le long d'une telle trajectoire classique présumée (notons en particulier le "trou" au centre de l'ellipse).

Pour souligner le caractère "quasi-classique" de l'état, nous montrons son évolution temporelle sur un cycle de la perturbation sur la figure 6.25. On aperçoit bien sur cette figure la dynamique de la probabilité quantique le long des *deux* ellipses (qui sont énergétiquement dégénérées) et dans chacun des cas, dans les deux sens possibles: ceci explique l'interférence relativement compliquée entre les quatre paquets d'onde se propageant le long des quatre trajectoires permises. Cet état de Floquet (ainsi que celui de la figure 6.24) représente un paquet d'onde atomique, *non dispersif*, se propageant essentiellement sur une trajectoire classique Coulombienne, accroché sur la fréquence externe de la micro-onde.

Dans nos études préliminaires de la dynamique classique tridimensionnelle, nous n'avons pas trouvé d'orbite périodique qui corresponde à la densité électronique des figures 6.23 et 6.26. Une hypothèse pour expliquer l'apparition d'un tel état "quasi-classique" dans le spectre de Floquet (que l'on observe d'ailleurs aussi à une amplitude réduite plus faible $F_0 = 0.043$, $n_0 = 23$) serait donc soit l'existence d'une orbite périodique classique correspondante à champ plus faible, soit l'existence d'une orbite classique pas nécessairement fermée mais précessant lentement dans un plan contenant l'axe du champ.

La première explication serait analogue à notre image appuyé sur la dynamique des niveaux du modèle unidimensionnel (cf. 5.5, 5.7.2). Dans dernier cas, la concentration d'un état propre (stationnaire!) le long d'une seule période de la trajectoire classique s'expliquerait par une séparation des échelles: du temps de la précession lente de la trajectoire classique d'un côté et du temps caractéristique de l'évolution quantique (induit par l'espacement typique des états propres du spectre), de l'autre côté. Les deux hypothèses ne s'excluent pas mutuellement mais sont plutôt complémentaires, s'appuyant respectivement sur une interprétation semiclassical et sur un argument de type localisation dynamique, cette fois dans l'espace de configuration.

Soulignons encore que des états de Floquet de ce type sont rares, mais pas vraiment exceptionnels. Dans le spectre, nous avons trouvé une deuxième résonance très similaire à celle des figures 6.23 et 6.25. Nous la représentons à la figure

6.26, moyennée sur la phase du champ ainsi que pour $\omega t = 0$ et $\omega t = \frac{\pi}{2}$. Comparé à la figure 6.25, cet état a une durée de vie plus longue (par environ un ordre de grandeur) et il semble couvrir deux paires d'ellipses de même orientation, mais de diamètres légèrement différents. Dans le langage utilisé dans l'étude des cicatrices on parlerait aussi d'une anti-cicatrice ("antiscar"), une fonction propre qui a une amplitude minimale au lieu de maximale le long de la trajectoire classique.

6.2.5 Conclusion

En résumé, nous avons développé une image générale de l'excitation d'un électron de Rydberg pendant son ionisation par un champ micro-onde.

Nous avons vu comment les différents choix d'états initiaux induisent une dynamique quantique plus ou moins mélangée. Nous avons vu les conséquences de ce mélange (ou d'une dynamique plus ou moins régulière) pour le seuil d'ionisation $F_0(10\%)$. Notamment, dans le cas d'une dynamique fortement mélangée, les mêmes valeurs de $F_0(10\%)$ peuvent être obtenues à partir de différents états initiaux (p , parabolique, $\ell \leq 15$).

De plus, nous avons pu associer quelques états du système atome-champ à des trajectoires classiques régulières, ce qui suggère la représentation de ces états de Floquet via une quantification EBK [134] du mouvement classique.

On a de plus trouvé une cicatrice de l'atome tridimensionnel dont nous attendons la population notamment à partir d'un état parabolique extrémal. D'autres états propres d'allure classique mais avec une correspondance classique moins évidente ont été aussi observés.

Tout cela indique que la seule mesure du seuil d'ionisation, sans référence à la nature précise de l'état initial des atomes, ne permet en *aucun* cas l'identification d'une fonction de résonance bien précise à l'origine des structures locales de $F_0(10\%)$ en fonction de ω_0 . Cette remarque s'applique notamment à la cicatrice le long des orbites classiques le long du champ (cf. figs. 6.22 et 6.24). La seule interprétation classique possible des expériences de Koch et al. [10, 28] n'est donc pas l'association de la "stabilité anormale" avec la cicatrice individuelle, mais plutôt à un effet globalement stabilisant induit par des structures de l'espace des phases classique tel que des cantores au voisinage de la résonance principale. Il en est ainsi non seulement à cause du fait que la cicatrice telle quelle n'a a priori pas de rapport avec le faible couplage au continuum (comme nous l'avons remarqué maintes fois au cours de ce mémoire), mais surtout à cause de l'imprécision de la définition de l'état initial des expériences de Stony Brook [132]. Une réduction de la dynamique quantique essentiellement à la dynamique (classiquement instable) du "scar" sera - par l'évidence nette de nos calculs - notablement plus favorisée par une expérience partant d'un état parabolique extrémal.

6.3 La stabilisation adiabatique d'un état circulaire

Nous finissons notre étude de la dynamique d'un atome tridimensionnel dans un champ oscillant par la mise en évidence d'une analogie surprenante entre le domaine optique et le domaine micro-onde (cf. 1, 2).

Afin d'isoler cet aspect général de la dynamique qui s'étend des fréquences micro-onde aux fréquences laser, nous choisissons un état initial de l'atome qui se mélange peu avec d'autres états pendant son excitation par le champ. Nous avons reconnu les possibles candidats pour un tel propos dans la section 6.2.3 : les états sphériques ou "lambda" extrémaux, ou bien, avec en plus une densité spectrale fortement réduite, l'état circulaire.

On a déjà remarqué que l'état circulaire incliné (ou sphérique extrémal) subit une limitation de son évolution "régulière" avec l'amplitude du champ, à cause de sa géométrie (cf. 6.2.3). Il reste donc les états "lambda" et circulaires. Pour notre étude, nous avons choisi les derniers.

6.3.1 Stabilisation adiabatique

Déjà, dans l'introduction de ce mémoire I, nous avons évoqué les caractéristiques principales de la stabilisation adiabatique [4, 72, 107]:

- L'énergie du photon est typiquement *plus grande* que le potentiel d'ionisation de l'état initial de l'atome.
- Après le passage par le régime perturbatif (où la durée de vie d'un état décroît avec l'intensité du champ laser), la durée de vie de l'atome dans le champ recommence à *croître* quand l'intensité *augmente*.

La figure 6.27 montre ce comportement, pour un état circulaire $|n_0 = 7 \ell_0 = 6 m_0 = 6 \rangle$ et un état sous-circulaire $|n_0 = 7 \ell_0 = 6 m_0 = 5 \rangle$ dans un champ laser de pulsation $\omega = 0.0428$ a.u. (= 1.16 eV; ceci correspond à environ quatre fois le potentiel d'ionisation de l'état $n_0 = 7$). La valeur maximale de l'intensité de $I_{\max} = 1 \times 10^{-2}$ a.u. correspond à 3.5×10^{14} W/cm².

Sur cette figure log-log on reconnaît très bien le minimum τ_{\min} de la durée de vie de l'état $|7 \ 6 \ 6 \rangle$ (resp. $|7 \ 6 \ 5 \rangle$) à $I_{\min} = 4.0 \times 10^{-4}$ a.u. = 1.4×10^{13} W/cm² (resp. 2.4×10^{13} W/cm²). Avec une valeur de $\tau_{\min} = 23.7$ ps, la durée de vie de l'état circulaire est ca. d'un facteur 3 plus longue que celle de l'état sous-circulaire, $\tau_{\min} = 8.1$ ps. De plus, il se produit à une intensité plus faible du champ, c'est-à-dire la stabilisation se manifeste *plus tôt* pour l'état circulaire [153].

La troisième courbe dans la figure montre le résultat pour l'état sous-circulaire, obtenu par Vos et al.[72], par une approche de type Floquet, mais impliquant une approximation Born qui décrit la probabilité électronique loin du noyau par des ondes planes. L'accord qualitatif entre les deux résultats est bon, bien que la différence des positions absolues des courbes soit importante pour une vérification expérimentale. Notre calcul exact (qui se trouve en parfait accord avec les

résultats indépendants d'autres auteurs [154]) fournit des valeurs légèrement plus basses de l'intensité laser.

Notons finalement que dans le régime au-delà de (I_{\min}, τ_{\min}) , la durée de vie de l'état circulaire croît par plus de deux ordres de grandeur, jusqu'à $\tau_{\max} = 3.2$ ns à $I_{\max} = 1.0 \times 10^{-2}$ a.u.. L'effet de stabilisation est moins prononcé pour l'état sous-circulaire.

6.3.2 La dynamique de la densité électronique

La figure 6.28 montre la densité électronique de l'état circulaire $|7\ 6\ 6\rangle$, à phase $\omega t = 0, \pi/4$ et $\pi/2$ du champ laser.

L'intensité du champ vaut $I = 1.0 \times 10^{-2}$ a.u. et correspond, d'après la figure 6.27, à la durée de vie la plus longue dans le régime de stabilisation que nous avons obtenue dans nos simulations. Pourtant, la densité électronique ne montre qu'une *très faible* distorsion le long de l'axe de polarisation du champ. En fait, l'excursion maximale de l'électron, induite par le champ oscillant, vaut 54.5 a.u., d'après la figure.

L'état circulaire adiabatement stabilisé montre donc la dynamique d'un électron libre dans un champ oscillant: l'équation (6.2) prévoit $Q = 54.6$ a.u. pour l'excursion de l'électron!

Ces constatations nous conduisent à deux conclusions:

1. La stabilisation adiabatique de l'atome *n'est pas* une *conséquence* d'une distorsion notable de la densité électronique dans l'espace de configuration. Il n'y a pas de dichotomie [80] de la fonction d'onde, qui avait été suggérée [80, 81, 82, 83] comme origine de ce phénomène.
2. La dynamique de l'état circulaire adiabatement stabilisé est tout-à-fait analogue à celle de l'état $|n_0 = 23\ \ell_0 = 22\ m_0 = 22\rangle$ dans un champ micro-onde (cf. 6.2.3, fig. 6.19).

La première conclusion a récemment été formulée indépendamment par d'autres auteurs [5], mais on n'a toujours pas trouvé une explication rigoureuse de la stabilisation adiabatique. Quand même, le résultat trouvé par Pont et al. [5] et dans le présent travail semble suggérer que l'origine de la stabilisation réside plutôt dans un changement de la structure du continuum atomique que de la structure des états liés.

Dans notre contexte actuel, la deuxième observation nous semble plus importante: l'essentielle invariance de la dynamique de la densité électronique sur une très grande gamme de fréquence et d'amplitude. Notons que l'intensité du laser vue par l'état circulaire de la figure 6.28 vaut, en unités réduites, $F_0 \simeq 240$, et que la fréquence laser s'exprime par une pulsation réduite de $\omega_0 \simeq 14.7$. Par rapport à la figure 6.19, l'amplitude et la pulsation réduite ont été augmentées respectivement par trois et un ordres de grandeur.

Ceci montre que les aspects de la dynamique quantique qui génèrent la localisation dynamique (cf. 6.2.3) d'un côté, et la stabilisation adiabatique de l'autre

côté, sont des aspects *bien distincts*. Pourtant, ils *coexistent*, car la dynamique “régulière” de l’état adiabatiquement stabilisé s’étend du domaine optique (cf. fig. 6.28) jusqu’au voisinage immédiat de la résonance principale (cf. fig. 6.19). C’est simplement par le choix approprié des paramètres externes et internes du problème qu’on augmente le poids de l’un par rapport à l’autre. Rappelons que, déjà sur la figure 6.13, on peut apercevoir un faible déplacement de la fonction d’onde suivant l’oscillation du champ. Elle est pourtant négligeable devant la dynamique de la structure nodale en elle-même, ce qui traduit la prépondérance de la localisation dynamique dans cette situation précise. En revanche, nous avons vu (cf. figs. 6.14 (b), (f)) que la dynamique d’un état “lambda” extrémal dans le champ micro-onde est essentiellement celle d’un état circulaire (fig. 6.13), et que l’augmentation du seuil d’ionisation de cet état avec la pulsation réduite est due à sa localisation “triviale” dans la base de Floquet [155]. On s’attend donc aussi à la stabilisation adiabatique de cet état dans le domaine optique.

Notre comparaison de la dynamique quantique de la densité électronique d’un état circulaire au domaine optique à celle au domaine micro-onde a donné lieu à la publication [156].

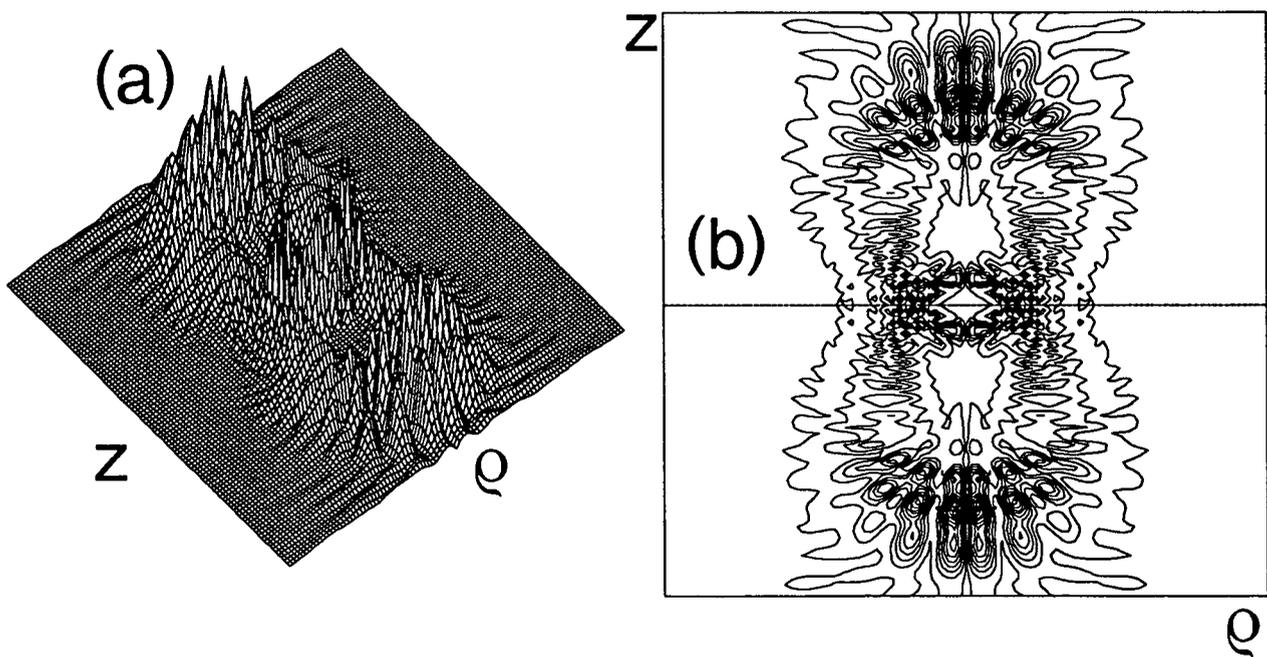


FIG. 6.23 - (a) Surface et (b) contours de la densité électronique moyennée sur une période de la perturbation de l'état propre à $\text{Re}\epsilon = -9.4607686 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon = -2.43317 \times 10^{-8}$, pour $F_0 = 0.0549$ et $\omega_0 = 1.304$ ($n_0 = 23$). $z, \rho = \pm 1600$ a.u..

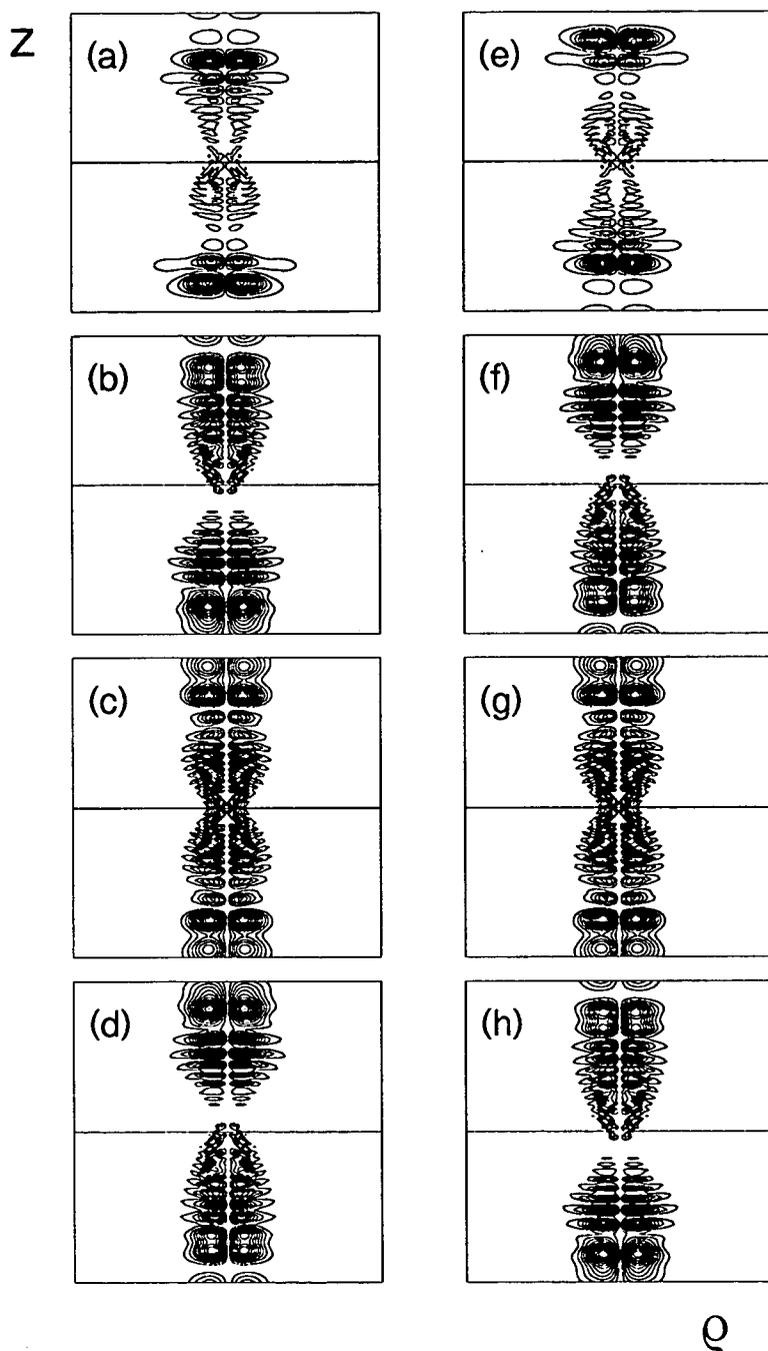


FIG. 6.24 - Évolution temporelle de l'état représenté par sa densité de probabilité moyenne dans la figure 6.23, sur les échelles $z, \rho = \pm 950$ a.u.. Phase de la micro-onde $\omega t =$ (a) 0, (b) $\frac{\pi}{4}$, (c) $\frac{\pi}{2}$, (d) $\frac{3\pi}{4}$, (e) π , (f) $\frac{5\pi}{4}$, (g) $\frac{3\pi}{2}$, (h) $\frac{7\pi}{4}$.

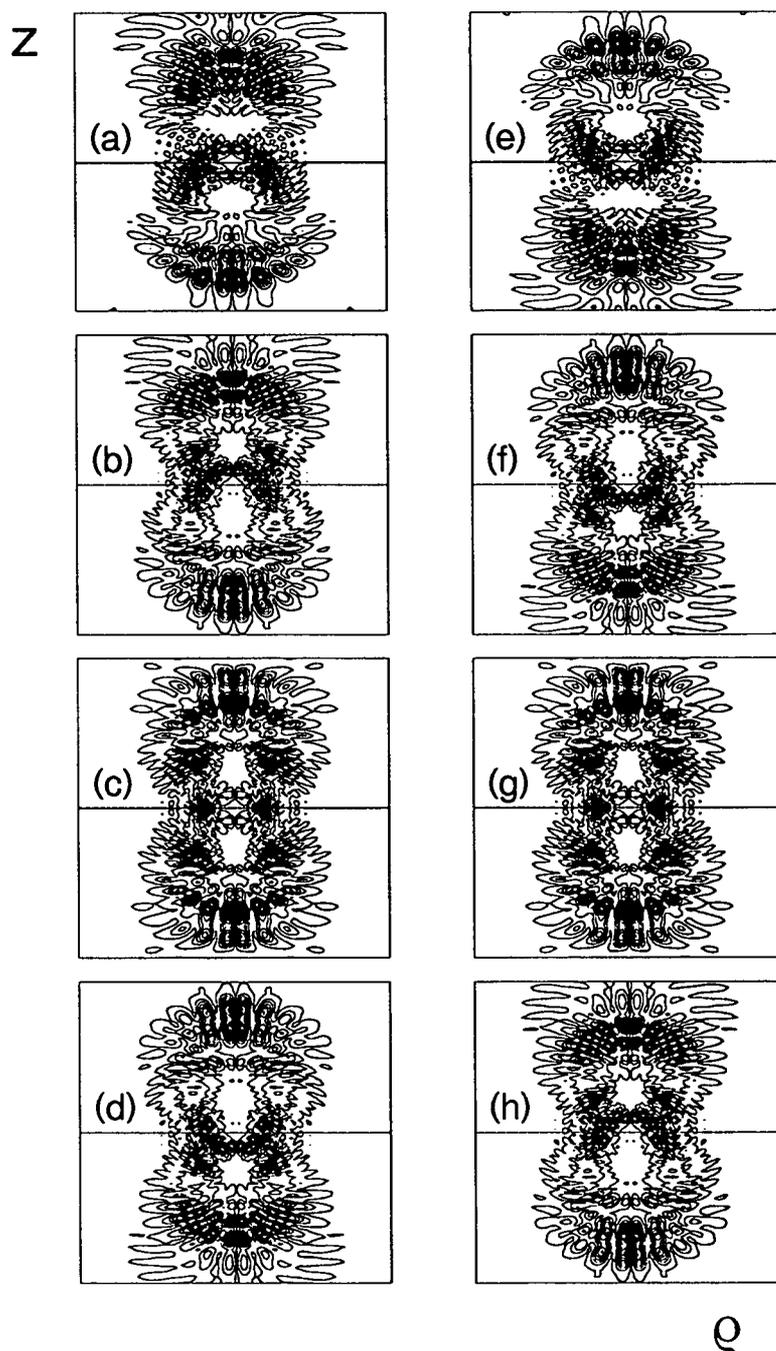


FIG. 6.25 - Évolution temporelle de l'état représenté par sa densité de probabilité moyenne dans la figure 6.23, sur les mêmes échelles $z, \rho = \pm 1600$ a.u.. Phase de la micro-onde $\omega t =$ (a) 0, (b) $\frac{\pi}{4}$, (c) $\frac{\pi}{2}$, (d) $\frac{3\pi}{4}$, (e) π , (f) $\frac{5\pi}{4}$, (g) $\frac{3\pi}{2}$, (h) $\frac{7\pi}{4}$.

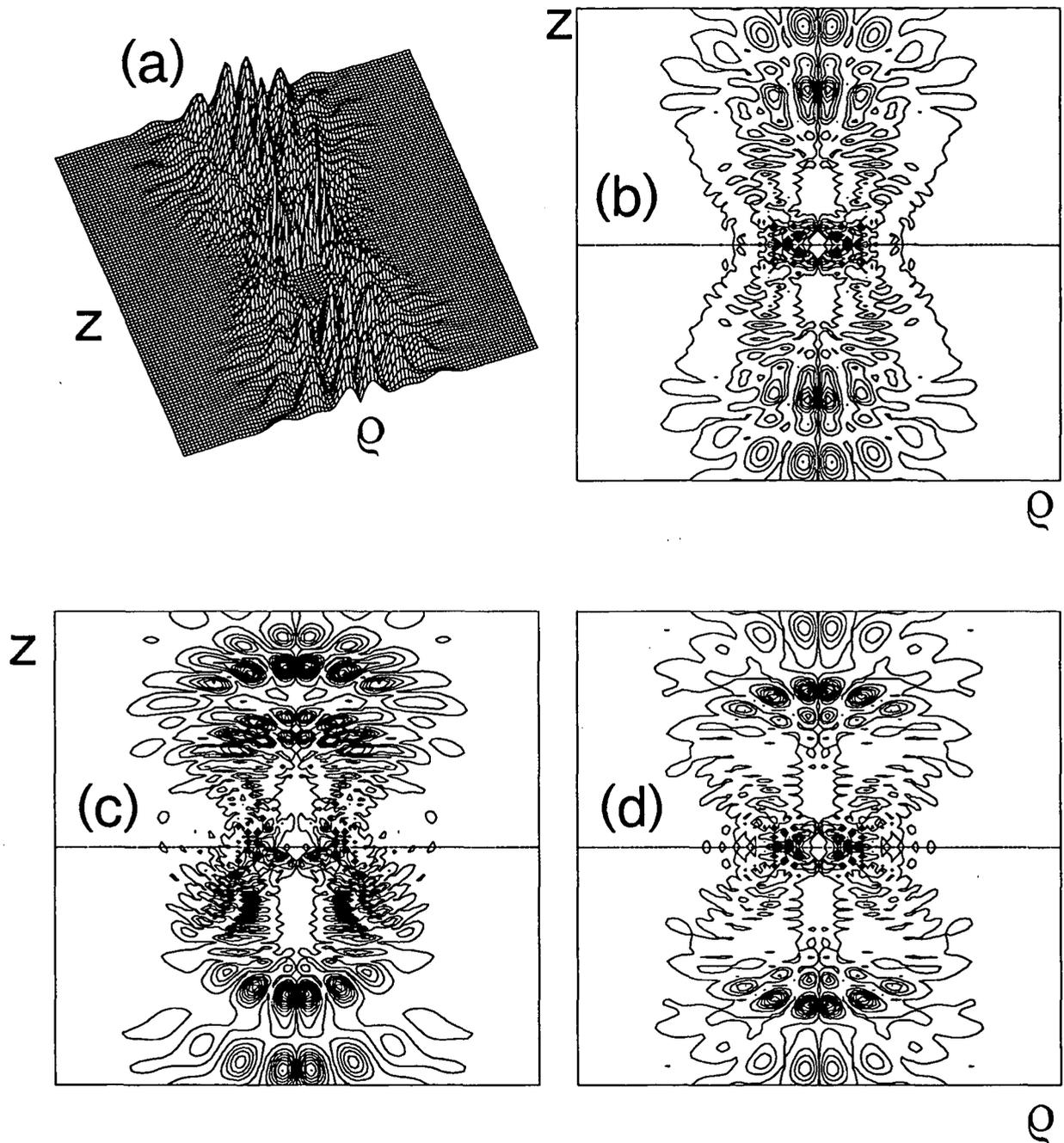


FIG. 6.26 - (a) Surface et (b) contours de la densité électronique moyennée sur une période de la perturbation de l'état propre à $\text{Re}\epsilon = -9.0935305 \times 10^{-4}$, $\text{Im}\epsilon = -1.9761761 \times 10^{-9}$, pour $F_0 = 0.0549$ et $\omega_0 = 1.304$ ($n_0 = 23$). Évolution temporelle du même état à $\omega t =$ (c) 0 et à (d) $\frac{\pi}{2}$. $z, \rho = \pm 1600$ a.u.. Voir aussi figure 6.7 (d).

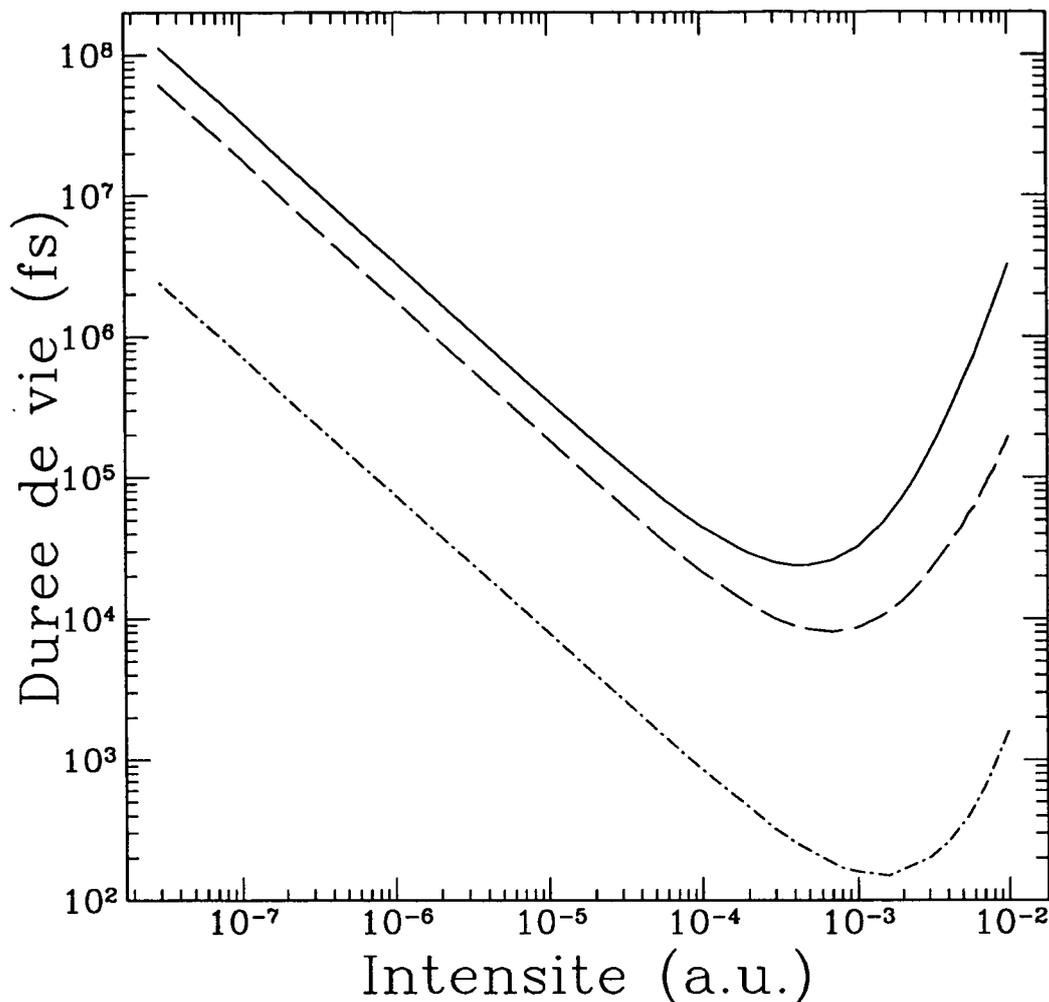


FIG. 6.27 - Durée de vie d'états de Floquet en fonction de l'intensité laser, en unités de laboratoire. La pulsation de laser est $\omega = 0.0428$ a.u. = 1.16 eV. L'état initial de l'atome est l'état circulaire $|n_0 = 7 \ell_0 = 6 m_0 = 6\rangle$ (trait continu) et, en comparaison avec résultats de la référence [72], l'état sous-circulaire $|n_0 = 7 \ell_0 = 6 m_0 = 5\rangle$ (ligne tiretée). La ligne tiretée-pointillée montre le résultat de [72]. Les unités atomiques de l'intensité, du temps et de la pulsation sont, respectivement, 3.50×10^{16} W/cm², 2.42×10^{-17} sec et 27.2 eV. Les positions des minima des deux courbes sont situés à ($I_{\min} = 1.4 \times 10^{13}$ W/cm², $\tau_{\min} = 23.7$ ps) (état circulaire) et à ($I_{\min} = 2.4 \times 10^{13}$ W/cm², $\tau_{\min} = 8.1$ ps) (état sous-circulaire). La durée de vie maximale de l'état circulaire à $I = 3.50 \times 10^{14}$ W/cm² vaut $\tau_{\max} = 3.23$ ns.

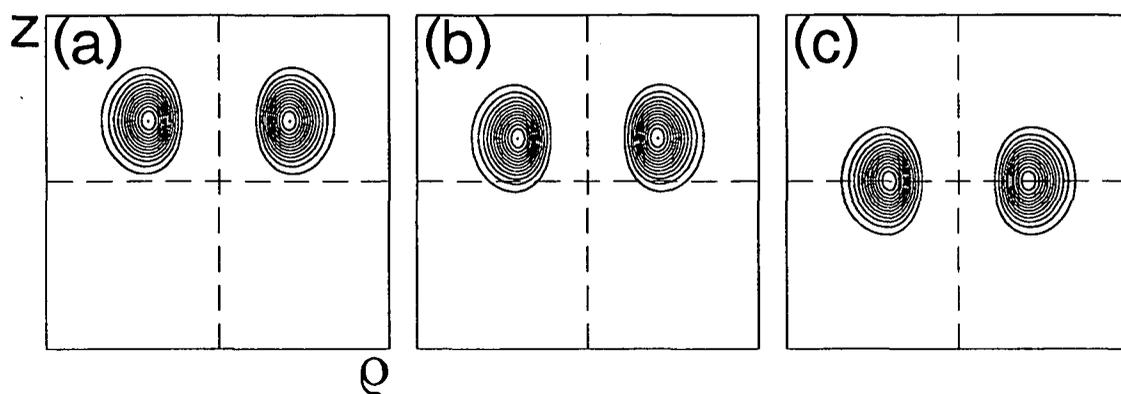


FIG. 6.28 - Evolution temporelle de l'état de Floquet issu de l'état circulaire $|n_0 = 7 \ell_0 = 6 m_0 = 6\rangle$, en coordonnées cylindriques $z, \rho = \pm 150$ a.u.. Intensité et pulsation du champ: $I = 1.0 \times 10^{-2}$ a.u., $\omega = 0.0428$ a.u. [72, 154, 5]. $F_0 \simeq 240$, $\omega_0 \simeq 14.7$. Phase du champ: (a) 0, (b) $\frac{\pi}{4}$, (c) $\frac{\pi}{2}$. Excursion maximale de la fonction d'onde le long de l'axe \hat{z} de polarisation du champ: 54.5 a.u.. Prévion du modèle d'un électron libre dans un champ oscillant à la même amplitude et la même pulsation (6.2): 54.6 a.u.. Largeur de l'état circulaire à ces paramètres du champ: $\Gamma \simeq 7.48 \times 10^{-9}$ a.u., durée de vie: $\tau = \Gamma^{-1} \simeq 3.2$ ns. L'atome a ainsi été stabilisé adiabatiquement par deux ordres de grandeur par rapport à sa durée de vie minimale de $\tau_{\min} = 23.7$ ps (cf. fig. 6.27). Notons la similarité de la dynamique à celle de l'état circulaire dans un champ micro-onde (cf. fig. 6.19).

Chapitre 7

Conclusion

Le sujet principal du travail que nous venons d'exposer est l'excitation et l'ionisation des états de Rydberg de l'atome d'hydrogène par un champ micro-onde.

Nous avons développé une approche générale à ce problème qui permet l'étude de *toutes* ses propriétés. L'utilisation des méthodes de la théorie des groupes, du théorème de Floquet et de la dilatation complexe nous ont permis l'accès *direct* aux "niveaux d'énergie" d'un atome d'hydrogène dans un champ micro-onde. Le théorème spectral nous a enfin permis de fournir des expressions explicites pour le calcul de plusieurs quantités utiles, telles que la dynamique temporelle des résonances individuelles ou la probabilité d'ionisation en fonction du temps.

Notre approche est très souple vis-à-vis d'un changement des paramètres externes, à condition de disposer d'ordinateurs suffisamment puissants. Elle peut aussi être appliquée au domaine des hautes fréquences (laser).

L'application de notre appareil technique au problème micro-onde a commencé par l'étude d'un modèle unidimensionnel de l'atome.

On a traité ici - pour la première fois - simultanément *tous* les aspects de la dynamique quantique. Après une comparaison globalement favorable des résultats numériques avec les résultats expérimentaux, nous avons analysé la dynamique des niveaux et les structures quantiques de l'espace des phases.

En intégrant ces deux aspects, nous avons mis en évidence l'origine de la stabilité de certaines fonctions d'onde localisées dans les régions instables de l'espace des phases: par la dynamique des niveaux, on a pu associer les cicatrices des fonctions d'onde à un "cantore" dans l'espace des phases, donc à un résidu d'une structure classique stable.

L'étude de la dynamique des niveaux a de plus fourni des indications pour des "fluctuations universelles" de la probabilité d'ionisation, en fonction de la pulsation du champ micro-onde. Ces fluctuations sont immédiatement reliées aux structures non-monotones du signal d'ionisation que nous avons observées - pour la première fois - dans le domaine des fréquences réduites plus grandes que 1.

Une étude systématique de la dépendance temporelle de la probabilité et du seuil d'ionisation a été entreprise pour la première fois du côté théorique. Elle a

révélé la sensibilité des structures non-monotones du signal d'ionisation vis-à-vis d'un changement du temps d'interaction expérimental, ainsi qu'une décroissance algébrique du seuil d'ionisation avec le temps d'interaction atome-microonde, sur quatre ordres de grandeur du temps d'interaction. Cette dernière observation se trouve en accord qualitatif avec des résultats expérimentaux obtenus sur l'ionisation des états de Rydberg du rubidium [32, 44].

Les résultats de notre étude unidimensionnelle se trouvent en accord total avec les prévisions de la théorie de la localisation dynamique. Quant aux analyses plus locales de l'excitation atomique [36, 135], nous pensons avoir clarifié le rôle des cicatrices d'une fonction d'onde dans un système de dynamique mixte-régulière-chaotique. Les deux approches prépondérantes dans la littérature nous semblent ainsi plutôt complémentaires que réellement contradictoires.

Dans la troisième partie de notre travail, nous avons entrepris la première étude de l'ionisation de l'atome tridimensionnel, en exploitant *tous* les degrés de liberté du problème.

Nous avons confirmé et nuancé la validité du modèle unidimensionnel pour l'ionisation des états initiaux orientés le long de l'axe de polarisation du champ. Nous avons vu que le seuil d'ionisation n'est pas lié de manière univoque à la nature précise de l'état initial, ni à la direction préférentielle de l'ionisation.

On a pu isoler trois types d'états initiaux (correspondant à trois types de symétrie distincts) qui ont une signature nette dans le spectre de Floquet. De toute évidence, les états circulaires inclinés et les atomes plats représentent les limites extrêmes des multiplets issus des couches d'énergie non perturbées, tandis que les états paraboliques extrémaux prennent des positions intermédiaires. Ces derniers sont essentiellement associés aux régions instables du mouvement classique, par un fort mélange des états de Floquet pendant l'excitation de l'atome réel.

Les états circulaires inclinés et les états "lambda" ont été associés à un mouvement classique stable. Tandis que les premiers subissent une limitation géométrique de leur dynamique "régulière", il n'en est pas ainsi pour les derniers. Par conséquent, les états "lambda" semblent les vrais "états propres" (approchés) du problème micro-onde au moins dans le domaine où la fréquence de la micro-onde est supérieure ou égal à la fréquence du mouvement Coulombien non perturbé ($\omega_0 > 1$).

A part ces considérations générales, nous avons pu visualiser les premières exemples d'une cicatrice de l'atome tridimensionnel. Quant à leur accessibilité dans une expérience, les états paraboliques extrémaux sont les états initiaux de premier choix pour une excitation efficace.

Suite à leur durée de vie très importante, et l'obéissance de leur dynamique temporelle aux équations du mouvement classique, ces états peuvent ainsi être considérés comme paquets d'onde non-dispersifs, accrochés à la micro-onde cohérente.

Dans le domaine micro-onde, nous avons enfin comparé les seuils d'ionisation des états circulaires inclinés et "lambda" extrémaux à ceux d'un état p (orienté le long du champ) et d'un état circulaire (plan perpendiculaire au champ). A part le

régime basses fréquences, l'état p montre systématiquement le seuil le plus faible, l'état circulaire le seuil le plus élevé. Les états circulaires inclinés et "lambda" se comportent de manière intermédiaire. Au voisinage de la résonance principale entre la fréquence du champ et la fréquence de Kepler, le seuil d'ionisation ne dépend que très faiblement de l'état initial de l'atome tridimensionnel.

Finalement, nous avons étudié la dynamique d'un état circulaire dans le domaine optique.

Nous avons confirmé la stabilisation adiabatique de cet état à des intensités laser suffisamment élevées et rejeté la dichotomie de la fonction d'onde comme explication de ce phénomène.

A part la dynamique temporelle de l'atome adiabatement stabilisé, nous avons pu mettre en évidence une caractéristique très nette s'étendant du régime optique au domaine micro-onde: le mouvement "quasi-libre" de la densité électronique exposée au champ oscillant dans les deux domaines. Celle-là permet de distinguer clairement entre la localisation dynamique et la stabilisation adiabatique. Il établit aussi le lien des deux régimes via le choix de l'état atomique initial.

De nombreuses choses restent à faire, entre autres :

- L'extension de l'étude du seuil d'ionisation des états $|n_0 = 23 \ell_0 = 1 m_0 = 0\rangle$ et $|n_0 = 23 \ell_0 = 22 m_0 = 22\rangle$ à l'intervalle de pulsation réduite $\omega_0 \in [2.5; 12.0]$ qui relie le domaine micro-onde au domaine hautes fréquences : on peut espérer gagner ainsi plus d'informations sur la compétition entre la stabilisation adiabatique et la localisation dynamique.
- L'analyse statistique de la distribution des énergies, des largeurs, et des anticroisements du modèle 1D ainsi que de l'atome tridimensionnel : étant un système avec un grand nombre ($\simeq 10$) de canaux de réaction, le problème micro-onde se prête à la comparaison avec les résultats obtenus pour le champ magnétique, où le nombre de canaux est typiquement faible [119, 146]. De plus, les distributions des largeurs et des anticroisements devraient fournir des informations utiles quant à la dépendance temporelle du seuil d'ionisation et les "fluctuations universelles" de la probabilité d'ionisation.
- Une analyse semiclassique de la structure des multiplets dont les constituants extrémaux sont respectivement les états circulaires inclinés et "lambda" extrémaux : les états paraboliques sont-ils les "separatrix states" du système micro-onde? Comment dépend la structure des multiplets de la pulsation réduite?
- L'application de la même approche aux atomes non hydrogénoïdes par une technique de type matrice-R [112]: est-ce que le cœur atomique explique les seuils d'ionisation systématiquement plus faibles observés pendant les expériences sur l'ionisation des états de Rydberg de rubidium [32, 44]? Quelle sera la structure typique des multiplets, avec les états ℓ non hydrogénoïdes?

Bibliographie

In Wahrheit besteht aber natürlich das Dasein mehr als zur Hälfte nicht aus Handlungen, sondern aus Abhandlungen, deren Meinung man in sich aufnimmt, aus Dafürhalten mit dementsprechendem Dagegenhalten und aus der aufgestapelten Unpersönlichkeit dessen, was man gehört hat und weiß.

Robert Musil, *Der Mann ohne Eigenschaften*.

- [1] B. Mühlshlegel, *Random matrix theory applied to electrons in small metal particles*, dans: Les Houches école d'été de physique théorique, session LII, édité par M.-J. Giannoni, A. Voros et J. Zinn-Justin, North-Holland, Amsterdam, 1991.
- [2] G. Maret, Phys. Bl. **48**, 161 (1992).
- [3] K. Burnett, V. C. Reed et P. L. Knight, J. Phys. **B26**, 561 (1993).
- [4] M. Pont, N. R. Walet, et M. Gavrila et C. W. McCurdy, Phys. Rev. Lett. **61**, 939 (1988).
- [5] M. Pont, S. R. Atlas, A. Bugacov, preprint (1993).
- [6] A. Buchleitner et D. Delande, non-publié.
- [7] G. Casati, B. V. Chirikov, D. L. Shepelyansky, et I. Guarneri, Phys. Rep. **154**, 77 (1987).
- [8] J. E. Bayfield, G. Casati, I. Guarneri, et D. W. Sokol, Phys. Rev. Lett. **63**, 364 (1989).
- [9] J. E. Bayfield et P. M. Koch, Phys. Rev. Lett. **33**, 258 (1974).
- [10] B. E. Sauer, M. R. W. Bellermand, et P. M. Koch, Phys. Rev. Lett. **68**, 1633 (1992).
- [11] S. Fishman, D. R. Grempel, et R. E. Prange, Phys. Rev. Lett. **49**, 509 (1982).

- [12] G. Casati, B. V. Chirikov et D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **53**, 2525 (1984).
- [13] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [14] P. W. Anderson, Rev. Mod. Phys. **50**, 191 (1978).
- [15] D. R. Grempel et R. E. Prange, S. Fishman, Phys. Rev. **A29**, 1639 (1984).
- [16] G. Casati, I. Guarneri, et D. L. Shepelyansky, Physica **A163**, 205 (1990).
- [17] J. G. Leopold et D. R. Richards, J. Phys. **B23**, 2911 (1990).
- [18] J. G. Leopold et D. R. Richards, J. Phys. **B24**, 1209 (1991).
- [19] O. Bohigas, *Random matrix theories and chaotic dynamics*, dans: Les Houches école d'été de physique théorique, session LII, édité par M.-J. Giamoni, A. Voros et J. Zinn-Justin, North-Holland, Amsterdam, 1991.
- [20] G. Casati et L. Molinari, F. Izraïlev, Phys. Rev. Lett. **64**, 1851 (1990).
- [21] Y. V. Fyodorov et A. D. Mirlin, Phys. Rev. Lett. **67**, 2405 (1991).
- [22] Y. V. Fyodorov et A. D. Mirlin, Phys. Rev. Lett. **69**, 1093 (1992).
- [23] P. A. Lee et T. V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985).
- [24] K. A. H. van Leeuwen, G. v. Oppen, S. Renwick, J. B. Bowlin, P. M. Koch, R. V. Jensen, O. Rath, D. Richards, et J. G. Leopold, Phys. Rev. Lett. **55**, 2231 (1985).
- [25] R. Blümel, R. Graham, L. Sirko, U. Smilansky, H. Walther, et K. Yamada, Phys. Rev. Lett. **62**, 341 (1989).
- [26] J. E. Bayfield et D. W. Sokol, *Highly excited hydrogen atoms in strong microwaves*, dans: Physics of Atoms and Molecules: Atomic Spectra and Collisions in External Fields. édité par K. T. Taylor, M. H. Nayfeh, C. W. Clark, Plenum Press, New York 1988.
- [27] J. E. Bayfield et D. W. Sokol, Phys. Rev. Lett. **61**, 2007 (1988).
- [28] E. J. Galvez, B. E. Sauer, L. Moorman, P. M. Koch, et D. Richards, Phys. Rev. Lett. **61**, 2011 (1988).
- [29] P. M. Koch, L. Moorman, B. E. Sauer, E. J. Galvez et K. A. H. v. Leeuwen, Physica Scripta **T26**, 51 (1989).
- [30] B. E. Sauer, S. Yoakum, L. Moorman, et P. M. Koch, Phys. Rev. Lett. **68**, 468 (1992).

- [31] R. Blümel, A. Buchleitner, R. Graham, L. Sirko, U. Smilansky, H. Walther, *Phys. Rev.* **A44**, 4521 (1991).
- [32] M. Arndt, A. Buchleitner, R. N. Mantegna, et H. Walther, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2435 (1991).
- [33] R. Blümel et U. Smilansky, *Z. Phys.* **D6**, 83 (1987).
- [34] J. G. Leopold et D. Richards, *Phys. Rev.* **A38**, 2660 (1988).
- [35] H. P. Breuer, K. Dietz, et M. Holthaus, *Z. Phys.* **D8**, 349 (1988).
- [36] R. V. Jensen, S. M. Susskind, et M. M. Sanders, *Phys. Rep.* **201**, 1 (1991).
- [37] R. V. Jensen, S. M. Susskind, et M. M. Sanders, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1476 (1989).
- [38] G. Casati et B. V. Chirikov, I. Guarneri, et D. L. Shepelyansky, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2927 (1987).
- [39] G. Casati, I. Guarneri, D. L. Shepelyansky, *IEEE J. Quantum Electron.* **24**, 1420 (1988).
- [40] J. G. Leopold et D. R. Richards, *J. Phys.* **B22**, 1931 (1989).
- [41] R. Blümel, U. Smilansky, *J. Opt. Soc. Am.* **B7**, 664 (1990).
- [42] R. V. Jensen et M. M. Sanders, M. Saraceno, B. Sundaram, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 2771 (1989).
- [43] F. Borgonovi, I. Guarneri, et P. Sempio, *Nuovo Cimento* **102B**, 151 (1988).
- [44] O. Benson, A. Buchleitner, G. Raithel, et M. Arndt, R. N. Mantegna, H. Walther, soumis à *Phys. Rev. A*.
- [45] M. C. Gutzwiller, *The semiclassical quantization of chaotic Hamiltonian systems*, dans: Les Houches école d'été de physique théorique, session LII, édité par M.-J. Giannoni, A. Voros et J. Zinn-Justin, North-Holland, Amsterdam, 1991.
- [46] Y.-C. Lai et C. Grebogi, R. Blümel, M. Ding, *Phys. Rev.* **A45**, 8284 (1992).
- [47] A. M. Ozorio de Almeida, *Hamiltonian Systems: Chaos and Quantization*, Cambridge University Press, Cambridge 1988.
- [48] A. J. Liebermann, M. A. Lichtenberg, *Irregular and Stochastic Motion*, Applied Mathematical Series, Vol. 38, Springer-Verlag, New York 1983.
- [49] M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics, I: Functional Analysis*, Academic Press, San Diego, 1980.

- [50] I. Percival, *Recent developments in classical mechanics*, dans: Les Houches école d'été de physique théorique, session LII, édité par M.-J. Giannoni, A. Voros et J. Zinn-Justin, North-Holland, Amsterdam, 1991.
- [51] G. Radons, T. Geisel, J. Rubner, *Classical chaos versus quantum dynamics: KAM tori and cantori as dynamical barriers*, dans: Lasers, Molecules and Methods, édité par J. O. Hirschfelder, R. E. Wyatt et R. D. Coalson, Wiley, 1989.
- [52] T. Geisel, G. Radons, et J. Rubner, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2883 (1986).
- [53] R. B. Shirts et W. P. Reinhardt, *J. Chem. Phys.* **77**, 5204 (1982).
- [54] O. Bohigas, S. Tomsovic, et D. Ullmo, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1479 (1990).
- [55] O. Bohigas, S. Tomsovic, et D. Ullmo, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 5 (1990).
- [56] O. Bohigas, S. Tomsovic, et D. Ullmo, *Phys. Rep.* **223**, 43 (1993).
- [57] R. T. Skodje, F. Borondo, et W. P. Reinhardt, *J. Chem. Phys.* **82**, 4611 (1985).
- [58] Y. Colin de Verdière, *Hyperbolic geometry in two dimensions and trace formulas*, dans: Les Houches école d'été de physique théorique, session LII, édité par M.-J. Giannoni, A. Voros et J. Zinn-Justin, North-Holland, Amsterdam, 1991.
- [59] E. J. Heller, *Wavepacket dynamics and quantum chaology*, dans: Les Houches école d'été de physique théorique, session LII, édité par M.-J. Giannoni, A. Voros et J. Zinn-Justin, North-Holland, Amsterdam, 1991.
- [60] C. R. Mahon, J. L. Dexter, P. Pillet et T. F. Gallagher, *Phys. Rev.* **A44**, 1859 (1991).
- [61] W. R. S. Garton et G. S. Tomkins, *Astrophys. J.* **158**, 839 (1969).
- [62] A. Holle, G. Wiebusch, J. Main, B. Hager, H. Rottke et K. H. Welge, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2594 (1986).
- [63] G. Wunner, U. Woelk, I. Zech, G. Zeller, T. Ertl, P. Geyer, W. Schweizer et G. Ruder, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 3261 (1986).
- [64] Iu C. H., Welch G. R., Kash M. M., Kleppner D., Delande D., Gay J. C., *Phys. Rev. Lett.* **66**, 145 (1991).
- [65] M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer, Berlin 1990.
- [66] D. Delande, *Atomes de Rydberg en champs statiques intenses*, Thèse de Doctorat d'état, Université Pierre et Marie Curie, Paris 1988.

- [67] G. Raithel, M. Fauth, et H. Walther, Phys. Rev. **A44**, 1898 (1991).
- [68] M. J. Gourlay, T. Uzer, et D. Farely, Phys. Rev. **A47**, 3113 (1993).
- [69] K. Richter, J. S. Briggs, D. Wintgen et E. A. Solov'ev, J. Phys. **B25**, 3929 (1992).
- [70] A. Einstein, Verh. d. Dtsch. Phys. Ges., Nr. 9/10, 82 (1917).
- [71] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos*, Springer-Verlag, Corrected 2nd Printing, Berlin 1992.
- [72] R. J. Vos et M. Gavril, Phys. Rev. Lett. **68**, 170 (1992).
- [73] Q. Su et J. E. Eberly, J. Javanainen, Phys. Rev. Lett. **64**, 862 (1990).
- [74] K. C. Kulander, K. J. Schafer, et J. L. Krause, Phys. Rev. Lett. **66**, 2601 (1991).
- [75] E. Huens et B. Piraux, Phys. Rev. **A47**, 1568 (1993).
- [76] F. Benvenuto et G. Casati, D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. **A47**, R786 (1993).
- [77] J. Grochmalicki, M. Lewenstein, et K. Rzażewski, Phys. Rev. Lett. **66**, 1038 (1991).
- [78] M. Gajda, J. Grochmalicki, M. Lewenstein, et K. Rzażewski, Phys. Rev. **A46**, 1638 (1992).
- [79] R. V. Jensen, B. Sundaram, Phys. Rev. **A47**, R778 (1993).
- [80] M. Pont, N. R. Walet, et M. Gavril, Phys. Rev. **A41**, 477 (1990).
- [81] R. Grobe, et M. R. Fedorov, Phys. Rev. Lett. **68**, 2592 (1992).
- [82] K. Burnett, P. L. Knight, B. R. M. Piraux, et V. C. Reed, Phys. Rev. Lett. **66**, 301 (1991).
- [83] V. C. Reed, P. L. Knight, and K. Burnett, Phys. Rev. Lett. **67**, 1415 (1991).
- [84] R. R. Jones et P. H. Bucksbaum, Phys. Rev. Lett. **67**, 3215 (1991).
- [85] L. D. Noordam, H. Staplefeldt, D. I. Duncan, et T. F. Gallagher, Phys. Rev. Lett. **68**, 1496 (1992).
- [86] M. Pont et M. Gavril, Phys. Rev. Lett. **65**, 2362 (1990).
- [87] M. Pont et R. Shakeshaft, Phys. Rev. **A44**, R4110 (1991).
- [88] R. V. Jensen, B. Sundaram, commentaire dans Phys. Rev. Lett. **65**, 1964 (1990).

- [89] R. Grobe et C. K. Law, *Phys. Rev.* **A44**, R4114 (1991).
- [90] B. Sundaram, R. V. Jensen, *Phys. Rev.* **A47**, 1415 (1993).
- [91] F. Benvenuto et G. Casati, D. L. Shepelyansky, *Phys. Rev.* **A45**, R7670 (1992).
- [92] F. Benvenuto, G. Casati, D. L. Shepelyansky, preprint (1993).
- [93] M. V. Berry, *Some quantum-to-classical asymptotics*, dans: Les Houches école d'été de physique théorique, session LII, édité par M.-J. Giannoni, A. Voros et J. Zinn-Justin, North-Holland, Amsterdam, 1991.
- [94] D. Wintgen et H. Friedrich, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 571 (1986).
- [95] D. Delande, *Chaos in atomic and molecular physics*, dans: Les Houches école d'été de physique théorique, session LII, édité par M.-J. Giannoni, A. Voros et J. Zinn-Justin, North-Holland, Amsterdam, 1991.
- [96] D. Delande et J. C. Gay, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2006 (1986).
- [97] T. Ericson, *Phys. Rev. Lett.* **5**, 430 (1960).
- [98] U. Smilansky, *The classical and quantum theory of chaotic scattering*, dans: Les Houches école d'été de physique théorique, session LII, édité par M.-J. Giannoni, A. Voros et J. Zinn-Justin, North-Holland, Amsterdam, 1991.
- [99] R. Loudon, *The quantum theory of light*, Clarendon Press, Oxford 1984².
- [100] J. G. Leopold et I. C. Percival, *phys. Rev. Lett.* **41**, 944 (1978).
- [101] M. Dörr, R. M. Potvliege, D. Proulx et R. Shakeshaft, *Phys. Rev.* **A43**, 3729 (1991).
- [102] G. Floquet, *Ann. École Norm. Sup.* **12**, 47 (1883).
- [103] V. I. Ritus, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **51**, 1544 (1966).
- [104] J. H. Shirley, *Phys. Rev.* **138**, B979 (1965).
- [105] Y. A. Zel'dovich, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **51**, 1492 (1966) [*Sov. Phys. JETP* **24**, 1006 (1967)].
- [106] H. P. Breuer et M. Holthaus, *Phys. Lett.* **A140**, 507 (1989).
- [107] R. Shakeshaft, *Comments At. Mol. Phys.* **28**, 179 (1992).
- [108] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, HRW International Editions, Philadelphia 1981.
- [109] M. S. P. Eastham, *The Spectral Theory of Periodic Differential Equations*, Scottish Academic Press, Edinburgh 1973.

- [110] C. Cohen-Tannoudji et S. Reynaud, *J. Phys.* **B10**, 345 (1977).
- [111] M. Rotenberg, *Ann. Phys. (N.Y.)* **19**, 262 (1962).
- [112] M. H. Halley, D. Delande et K. T. Taylor, *J. Phys.* **B25**, L525 (1992).
- [113] O. Hittmair, *Lehrbuch der Quantentheorie*, Verlag Karl Thieme, München 1972.
- [114] K. Yajima, *Comm. Math. Phys.* **87**, 331 (1982).
- [115] S. Graffi et al., *Ann. Inst. H. Poincaré* **42**, 215 (1985).
- [116] B. R. Johnson, W. P. Reinhardt, *Phys. Rev.* **A28**, 1930 (1983).
- [117] A. Maquet et S.-I. Chu, W. P. Reinhardt, *Phys. Rev.* **A27**, 2946 (1983).
- [118] D. Delande, A. Bommier, et J. C. Gay, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 141 (1991).
- [119] Y. K. Ho, *Phys. Rep.* **99**, 1 (1983).
- [120] W. P. Reinhardt, *Ann. Rev. Phys. Chem.* **33**, 223 (1982).
- [121] E. Balslev et J. M. Combes, *Comm. Math. Phys.* **22**, 280 (1971).
- [122] M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics, IV: Analysis of Operators*, Academic Press 1978.
- [123] M. Hillery, R. F. O'Connell, M. O. Scully et E. P. Wigner, *Phys. Rep.* **106**, 123 (1984).
- [124] T. Ericson et A. Ruhe, *Math. Comp.* **35**, 1251 (1980).
- [125] D. Delande, en preparation.
- [126] D. Wintgen et D. Delande, *J. Phys.* **B26**, L399 (1993).
- [127] R. M. Potvliege et R. Shakeshaft, *Phys. Rev.* **A38**, 4597 (1988).
- [128] B. V. Chirikov, *Phys. Rep.* **52**, 263 (1979).
- [129] F. M. Izraïlev, D. L. Shepelyansky, *Teor. Mat. Fiz.* **43**, 417 (1980).
- [130] G. Casati, J. Ford, I. Guarneri, F. Vivaldi, *Phys. Rev.* **A34**, 1413 (1986).
- [131] B. V. Chirikov, *Time-dependent quantum systems*, dans: Les Houches école d'été de physique théorique, session LII, édité par M.-J. Giannoni, A. Voros et J. Zinn-Justin, North-Holland, Amsterdam, 1991.
- [132] D. Richards, J. G. Leopold, P. M. Koch, E. J. Galvez, K. A. H. v. Leeuwen, L. Moorman, B. E. Sauer et R. V. Jensen, *J. Phys.* **B22**, 1307 (1989).

- [133] J. G. Leopold et D. Richards, J. Phys. **B22**, 1931 (1989).
- [134] H. P. Breuer et M. Holthaus, Ann. Phys. (N.Y.) **211**, 249 (1991).
- [135] P. M. Koch, CHAOS **2**, 131 (1992).
- [136] H. P. Breuer, K. Dietz et M. Holthaus, Z. Phys. **D18**, 239 (1991).
- [137] H. P. Breuer, K. Dietz et M. Holthaus, J. Phys. **B22**, 3187 (1989).
- [138] R. Blümel, G. Jaeckel et U. Smilansky, Phys. Rev. **A39**, 450 (1989).
- [139] L. Moorman, E. J. Galvez, B. E. Sauer, A. Mortazawi-M., K. A. H. v. Leeuwen, G. v. Oppen et P. M. Koch, Phys. Rev. Lett. **57**, 771 (1988).
- [140] B. Meerson, Phys. Rev. Lett. **62**, 1615 (1989).
- [141] E. Ott, T. M. Antonson, Jr., et J. D. Hanson, Phys. Rev. Lett. **53**, 2187 (1989).
- [142] D. Cohen, Phys. Rev. **A43**, 639 (1991).
- [143] S. Fishman et D. L. Shepelyansky, Europhys. Lett. **16**, 643 (1991).
- [144] R. Scharf et B. Sundaram, Phys. Rev. **A45**, 3615 (1992).
- [145] R. Scharf et B. Sundaram, Phys. Rev. **A46**, 3164 (1992).
- [146] B. Grémaud, D. Delande et J. C. Gay, Phys. Rev. Lett. **70**, 1615 (1993).
- [147] J. A. Yeazell, M. Mallalieu, et C. R. Stroud, Jr., Phys. Rev. Lett. **64**, 2007 (1990).
- [148] J. A. Yeazell, G. Raithel, L. Marmet, H. Held, et H. Walther, **70**, 2884 (1993).
- [149] S. W. McDonald et A. E. Kaufmann, Phys. Rev. Lett. **42**, 1189 (1979).
- [150] M. V. Berry, J. Phys. **A10**, 2083 (1977).
- [151] A. Buchleitner et D. Delande, Phys. Rev. Lett. **70**, 33 (1993).
- [152] D. Meschede, J. Opt. Soc. Am. **B4**, 413 (1987).
- [153] R. M. Potvliege et P. H. G. Smith, preprint (1993), accepté pour publication dans Phys. Rev. **A**.
- [154] R. M. Potvliege, présenté sur le SILAP-III-workshop, Han sur Lesse, janvier 1993.
- [155] S. Fishman, *Quantum Localization*, Lecture notes for the International School of Physics "Enrico Fermi" on Quantum Chaos, Varenna, Villa Monastero, 23 juillet - 2 août 1991.

- [156] A. Buchleitner et D. Delande, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3633 (1993).

Zusammenfassung

Wir entwickeln einen theoretischen Apparat zur detaillierten numerischen Analyse der Wechselwirkung realer (dreidimensionaler) Wasserstoffatome mit starken Strahlungsfeldern. Die Anwendung dieser Methode auf die Mikrowellenionisation von Wasserstoff-Rydbergatomen stellt die gegenwärtig wirklichkeitsgetreueste numerische Simulation auf diesem Gebiet dar. Ausgehend von einem eindimensionalen Modell des Wasserstoffatoms stellen wir eine eingehende Untersuchung von Ionisationssignalen und -schwellenwerten, sowie der Niveaudynamik und der Projektionen der zugehörigen Eigenfunktionen auf den Phasenraum vor. Der Vergleich mit dem Ionisationsverhalten dreidimensionaler Wasserstoffatome bestätigt die Gültigkeit des eindimensionalen Ansatzes sowie der Theorie der dynamischen Lokalisierung für atomare Anfangszustände hoher Exzentrizität, jedenfalls zur Beschreibung der experimentell ermittelten Ionisationsschwellenwerte der Mikrowellenamplitude. Wir identifizieren drei Klassen atomarer Anfangszustände, die sich in ihren wohldefinierten Symmetrieeigenschaften jenen der Eigenzustände des Mikrowellenproblems mehr oder weniger gut anpassen. "Vernarbte" Wellenfunktionen dreidimensionalen Wasserstoffs im Mikrowellenfeld werden gezeigt. Abschließend vergleichen wir die Dynamik eines zirkularen Zustandes in einem Mikrowellenfeld mit jener in einem hochintensiven Laserfeld.

Stichworte: Komplexe Dilatation, dynamische Lokalisierung, adiabatische Stabilisierung, "vernarbte" Wellenfunktionen, Mehrphotonenionisation, Rydbergzustände, Chaos, Quantenchaos.

Riassunto

Sviluppiamo un formalismo teorico che fornisce una metodologia potente per l'analisi numerica particolareggiata dell'interazione di un atomo di idrogeno tridimensionale con un campo di radiazione intensa. L'applicazione di questo metodo alla ionizzazione degli stati di Rydberg dell'idrogeno indotta da un campo a microonde costituisce l'esperimento numerico più realistico mai realizzato in questo campo. Utilizzando un modello unidimensionale dell'atomo eseguiamo un'analisi approfondita dei segnali e delle soglie d'ionizzazione, della dinamica dei livelli e delle proiezioni delle funzioni d'onda associate sullo spazio delle fasi. Un confronto con la ionizzazione dell'atomo reale tridimensionale conferma la validità del modello unidimensionale e, quindi, della teoria della localizzazione dinamica per gli stati iniziali estesi, fintanto che la soglia d'ionizzazione è considerata. Tre classi di stati iniziali tridimensionali, con simmetrie distinte, sono identificate, esse si adattano più o meno bene alle simmetrie degli autostati del problema a microonde. Mostriamo alcune "cicatrici" delle funzioni d'onda dell'idrogeno esposto ad un campo a microonde. Per ultimo, la dinamica di uno stato circolare in presenza di un campo a microonde è confrontata con quella in presenza di un campo di laser ultra-intenso.

Parole chiavi: Dilatazione complessa, localizzazione dinamica, stabilizzazione adiabatica, "cicatrici" di funzioni d'onda, ionizzazione multifotonica, stati di Rydberg, caos, caos quantistico.

Nom: ANDREAS BUCHLEITNER

Titre: ATOMES DE RYDBERG EN CHAMP MICRO-ONDE: RÉGULARITÉ ET CHAOS

Résumé

Nous développons un formalisme théorique qui fournit un outil puissant pour l'analyse numérique détaillée de l'interaction d'un atome d'hydrogène tridimensionnel avec un champ de rayonnement intense. L'application de cette approche à l'ionisation des états de Rydberg de l'atome d'hydrogène par une micro-onde constitue l'expérience numérique la plus réaliste jamais réalisée dans ce domaine. Pour un modèle unidimensionnel de l'atome, nous effectuons une analyse approfondie des signaux et des seuils d'ionisation, de la dynamique des niveaux et des projections des fonctions d'onde associées sur l'espace des phases. Une comparaison avec l'ionisation de l'atome réel tridimensionnel confirme la validité du modèle unidimensionnel et ainsi de la théorie de la localisation dynamique pour les états initiaux étendus, tant que le seuil d'ionisation est concerné. Trois classes d'états initiaux tridimensionnels sont identifiés, avec des symétries distinctes, s'adaptant plus ou moins bien aux symétries des états propres du problème microonde. Nous montrons quelques "cicatrices" de fonctions d'onde de l'hydrogène exposé à un champ micro-onde. Finalement, la dynamique d'un état circulaire dans un champ micro-onde et celle dans un champ laser ultra-intense sont comparées.

Mots clés: Dilatation complexe, localisation dynamique, stabilisation adiabatique, "cicatrices" de fonctions d'onde, ionisation multiphotonique, états de Rydberg, chaos, chaos quantique.

Abstract

We develop a theoretical formalism which provides a powerful tool for the detailed numerical analysis of the interaction of three-dimensional hydrogen atoms with an intense radiation field. The application of this approach to the microwave ionization of Rydberg states of hydrogen provides the most realistic numerical experiments in this area up to date. A profound analysis of ionization signals and thresholds, of level dynamics and the phase space projections of associated wavefunctions is provided for a one-dimensional model of the atom. Comparison to the ionization of three-dimensional atoms confirms the validity of the one-dimensional model for extended initial states and, hence, dynamical localization theory, as far as the ionization threshold is concerned. Three classes of three-dimensional initial states with distinct symmetries are identified and shown to be more or less adapted to the symmetries of the eigenstates of the microwave problem. "Scarred" wavefunctions of the three-dimensional hydrogen atom exposed to microwave field are shown. Finally, the dynamics of a circular state in a microwave and in an intense laser field are compared.

Key words: Complex dilation, dynamical localisation, adiabatic stabilisation, "scarred" wavefunctions, multiphoton ionisation, Rydberg states, chaos, quantum chaos.