No. d'ordre : 4605

Institut d'Optique Théorique et Appliquée

Université de Paris-Sud

Unité de Recherche et de Formation Scientifique d'Orsay

Thèse

présentée pour obtenir

le grade de Docteur en Sciences

de l'Université Paris XI Orsay

par

Carsten Henkel

Sujet :

Réflexion et diffraction d'atomes lents par un miroir à onde évanescente

Soutenue le 11 décembre 1996 devant la Commission d'examen

M. C. Imbert	Président
M. J. Dalibard	Rapporteur
M. J. Mlynek	Rapporteur
M. K. Mølmer	Rapporteur
M. C. Bordé	Examinateur
M. J.-J. Greffet	Examinateur
M. R. Kaiser	Examinateur
M. A. Aspect	Directeur de thèse

Forword to the electronic version

This electronic version of the Ph.D. thesis of Carsten Henkel has been finished in August 2004, about eight years after the thesis has been defended at the Université de Paris Sud (Orsay, France). It does not contain the papers published by the author that can be accessed either via international journals or via the eprint server “arxiv.org”.

This electronic version is based on the original .tex files, without any changes except size adjustments for the figures. The original figures were in the “Windows Meta File” (wmf) format and have been converted into “Encapsulated PostScript” (eps) using shareware tools like “Open Office”. Some figures have been re-drawn with a newer version of the “Mathematica” program, this may explain their lacking aesthetics.

I sincerely thank my doctoral supervisor, Alain Aspect, for reminding me several times that an electronic version would be useful.

Avant-propos à la version électronique

Cette version électronique de la thèse de doctorat de M. Carsten Henkel a été achevée en août 2004, environ huit ans après sa soutenance à l'Université de Paris Sud (Orsay). Elle ne contient pas les articles publiés par l'auteur qui sont accessibles soit dans des grandes revues internationales, soit via le serveur électronique «arxiv.org».

Cette version électronique utilise les fichiers .tex originaux, sans modifications à part des corrections de mise en page pour les figures. Les figures originales, en format «Windows Meta File» (wmf), ont été converties vers le format «Encapsulated PostScript» (eps) à l'aide de logiciels gratuits comme «Open Office». Quelques figures ont été re-dessinées avec une version plus récente du logiciel «Mathematica». Ceci pour expliquer leur esthétique réduite.

Je remercie mon directeur de thèse, M. Alain Aspect, de m'avoir rappelé à plusieurs reprises l'utilité d'une version électronique.

C. Henkel, Potsdam, Août 2004
carsten.henkel@quantum.physik.uni-potsdam.de

à Valérie
et son « atmosphère »

Plan du mémoire

PARTIE I

RÉFLEXION SPÉCULAIRE D'ATOMES PAR LE MIROIR À ONDE ÉVANESCENTE

PARTIE II

DIFFRACTION D'ATOMES PAR UNE ONDE ÉVANESCENTE STATIONNAIRE

PARTIE III

RÉFLEXION DIFFUSE D'ATOMES PAR LE MIROIR À ONDE ÉVANESCENTE

Remerciements

Le présent travail a été effectué à l'Institut d'Optique Théorique et Appliqué à Orsay dont je remercie le directeur, M. Christian Imbert, de m'y avoir accueilli. Je suis également honoré du fait qu'il ait accepté de présider le jury.

J'ai eu le privilège de travailler au sein de l'équipe d'optique atomique dirigée par M. Alain Aspect. Les échanges constants entre ses physiciens expérimentateurs, Mme Nathalie Westbrook, M. Robin Kaiser et M. Chris I. Westbrook, m'ont aidé à diversifier mes approches théoriques et à veiller à ce que leur interprétation physique soit la plus intuitive («anschaulich») *possible. A cet égard, je dois également beaucoup à M. Claude Cohen-Tannoudji.*

Je tiens à remercier toute l'équipe d'optique atomique, en particulier Alain Aspect, mon directeur de thèse, et Robin Kaiser pour le soin qu'ils ont pris de relire le manuscrit ; Arnaud Landragin avec lequel j'ai eu de nombreuses discussions sur la diffraction et la réflexion diffuse d'atomes ; Philippe Bonnet et Gabriel Horvath qui ont été à tour de rôle conseillers informatiques et infirmiers pour mon ordinateur ; Stéphane Martin avec lequel j'ai éprouvé un plaisir tranquille à partager le bureau ; Christophe Jurczak qui a vécu à la même période que moi les derniers mois serrés de la vie d'un thésard, et finalement Jean-Yves Courtois avec lequel j'ai coopéré en théorie et qui m'a aidé à démarrer parmi le groupe des expérimentateurs.

Au sein de l'Institut d'Optique, mes remerciements vont à Mike Miller qui m'a donné plus d'une fois des repères dans le monde UNIX ; ainsi qu'à Raymond Mercier, Michel Mullot, Yves Clothaire, Françoise Bridou et Jean-Pierre Chauvineau sans lesquels les mesures de rugosité dans l'atelier d'optique et dans le laboratoire de microscopie à force atomique n'auraient pas eu lieu. Je garde un vif souvenir de la rencontre avec M. L. Prod'homme qui fut un des pionniers de la caractérisation de la rugosité par diffusion de lumière à l'Institut d'Optique. Finalement, un grand merci à Françoise Pellegrino qui a assuré le tirage de ce mémoire avec gentillesse.

J'ai été honoré du fait que M. Jean Dalibard du Laboratoire Kastler–Brossel de l'Ecole Normale Supérieure (Paris) ait été prêt à être rapporteur. Je me rappelle encore avec plaisir notre coopération fructueuse — à forces conjointes avec Robin Kaiser et Andrew Steane — au sujet du miroir vibrant. J'ai vécu d'autres moments mémorables avec Yvan Castin et Pippa Storey après un séminaire informel du groupe de M. Cohen-Tannoudji, et avec Pascal Szriftgiser un soir dans un café à Innsbruck.

Je me souviens que les rencontres avec les membres du groupe de l'Institut Galilée de l'Université de Paris-Nord à Villetaneuse, avec Rosa Brouri, Jacques Baudon, Vincent Lorent et Christian Miniatura, furent stimulantes et m'ont encouragé. Je tiens particulièrement à remercier M. Christian Bordé d'avoir été disponible pour faire partie du jury.

Autour de la réflexion diffuse — ou bien de la lumière ou bien d'atomes —, une discussion fructueuse a eu lieu avec Anne Sentenac, Rémi Carminati et Jean-Jacques Greffet de l'Ecole Centrale (Paris). Je les remercie pour l'intérêt qu'ils ont porté à notre travail, et en particulier M. Greffet qui a bien voulu participer au jury.

Je remercie Maciek Lewenstein et H.-J. Ernst du Centre d'Etudes du C.E.A. à Saclay de m'avoir accueilli, à des moments différents, et pour tout ce que j'ai pu apprendre de nos rencontres.

Je suis reconnaissant à M. Jürgen Mlynek de l'Université de Constance (Allemagne) de s'être engagé à rédiger un rapport et de son bon accueil. Les discussions que j'ai eues à Constance avec Martin Wilkens, Tilman Pfau et Vahid Sandoghdar m'ont ouvert plusieurs horizons.

Puis, je voudrais exprimer mes remerciements sincères à M. Klaus Mølmer de l'Université de Aarhus (Danemark) pour son accueil, pour le temps que nous avons passé ensemble dans un échange fécond (auquel s'est joint cette année son collègue Ejvind Bonderup), pour son encouragement et pour son travail en tant que rapporteur.

Finalement, je voudrais mentionner quelques-uns de ceux que j'ai rencontrés sur mon chemin et sans lesquels je serais devenu un autre : Bernard d'Espagnat envers qui j'éprouve un respect profond, Markus Oberthaler et Klaus Sengstock dont j'ai fait la connaissance lors de ma première conférence, Rüdiger Timm et Tim Freyer qui ont fidèlement gardé le contact avec moi, Ralf Quadt et Maria Reich avec qui j'ai discuté à Peyresq, Serge Reynaud dont les approches m'ont fait beaucoup réfléchir, Peter Horak, Ernst M. Rasel et Johannes Söding de la rencontre des «jeunes opticiens atomiques», Wilbert Rooijakkers qui sortit un papier curieux de von Neumann et Wigner de sa poche, Greg J. Liston, un collègue théoricien du miroir à atomes, merci encore à Jens Christensen pour son accueil à Aarhus, merci à Ralf Deutschmann, Markus Schiffer et Wolfgang Ertmer pour les échanges à Iéna ainsi qu'à Hanovre.

Je remercie également la Communauté Chrétienne de la Faculté d'Orsay pour son accueil, et Gretchen Berquist, Laurence Hazemann et Marie-Caroline Saussier qui se sont intéressées malgré tout au sujet étrange que j'étudiais.

Mes remerciements vont à Dirk Henkel qui, depuis la soirée des polyèdres de Platon, a été un compagnon précieux, devenu un frère.

Que mes parents qui m'ont accompagné et aidé dans mes choix, reçoivent ici l'expression de ma profonde reconnaissance.

Ce mémoire est dédié à Valérie en face de qui j'adviens ; c'est elle qui m'a soutenu.

Sommaire

Partie II

Diffraction d'atomes par une onde évanescente stationnaire

Partie III

Réflexion diffuse d'atomes par le miroir à onde évanescente

Introduction générale

Introduction générale

A présent, nous voyons dans un miroir et de façon confuse,
mais alors, ce sera face à face.
A présent, notre connaissance est limitée.

Première Lettre aux Corinthiens 13, 12

L'optique atomique est un domaine relativement récent qui se situe au carrefour de l'optique traditionelle, de la physique atomique et de la mécanique quantique. L'on y cherche à agir sur le mouvement d'un ensemble d'atomes, comme l'optique traditionnelle agit sur la propagation d'un faisceau lumineux, pour réaliser des éléments optiques tels que des miroirs, des lentilles, des réseaux de diffraction et des interféromètres. Dans le présent travail de thèse, nous étudions le miroir à atomes réalisé par une onde évanescente lumineuse, en suivant la proposition de R. J. COOK et R. K. HILL de 1982 [1]. Afin d'étudier un tel dispositif, trois voies d'approches s'envisagent : le point de vue de l'opticien, celui du physicien atomique et celui de la mécanique des ondes de matière. Nous entendrons d'abord l'opticien situer le miroir à atomes en tant qu'élément de l'optique atomique. Ensuite, nous demanderons au physicien comment se présente une expérience-type du miroir à atomes, ainsi que d'expliquer les principes physiques de la réflexion. Puis, nous écouterons une discussion entre collègues au sujet des difficultés des réseaux de diffraction en réflexion et de la réflexion spéculaire. Finalement, nous écouterons l'approche du «mécanicien quantique» à la description théorique du miroir à atomes. C'est également lui qui présentera le plan du présent mémoire ainsi qu'un «guide de lecture» à travers ce mèmoire dont nous sommes conscient du volume.

1 Le point de vue de l'opticien

Le miroir à atomes est un élément-clé de l'optique atomique pour plusieurs raisons :

En optique habituelle, les miroirs ont permis de construire des systèmes optiques *non dispersifs*, ce qui fut une avancée significative pour les téléscopes astronomiques, par exemple. La question est de taille pour l'optique atomique parce que les faisceaux d'atomes sont généralement loin d'être monochromatiques (monocinétiques).

En dotant le miroir d'une surface concave, il se transforme en une *lentille* avec laquelle l'on peut focaliser un faisceau atomique. Comme la longueur d'onde des atomes est généralement beaucoup plus petite que la longueur d'onde optique, un faisceau d'atomes focalisés serait un outil de préférence pour deux applications de l'optique atomique qui émergent actuellement dans la recherche : d'une part dans la lithographie atomique où les atomes servent à écrire des structures sur un substrat [2, 3, 4, 5] ; et d'autre part dans l'analyse de surfaces : l'on mesure alors ou bien les atomes diffusés par une surface [6], ou bien — s'il s'agit d'atomes métastables — l'électron éjecté lorsque l'atome entre en contact avec la surface [7]. Dans les deux applications, les atomes pourraient permettre d'atteindre une résolution spatiale sur la surface qui est de l'ordre de quelques nanomètres.

Le miroir à atomes permet de réaliser des *interféromètres* atomiques où il retourne les trajectoires atomiques pour recombiner les bras de l'interféromètre. L'interférométrie atomique présente d'abord une haute résolution à cause de la petite longueur d'onde atomique, et ensuite, ayant une masse non nulle, les atomes sont sensibles au champ de pesanteur [8] ainsi qu'aux forces d'inertie [9].

Finalement, le miroir se transforme en *réseau de diffraction* lorsque sa surface présente une modulation périodique. L'onde atomique incidente est séparée en plusieurs ondes diffractées qui se propagent dans des directions différentes. Ces ondes sont cohérentes entre elles de sorte que le réseau en réflexion peut servir de séparatrice dans un interféromètre. La diffraction d'atomes par une onde évanescente stationnaire a été proposée par J. V. HAJNAL et G. I. OPAT de l'Université de Melbourne (Australie) en 1989 [10], et le même groupe a également proposé des réseaux de diffraction électrostatique et magnétique en 1992 [11]. La diffraction par une onde évanescente stationnaire fut observée en 1994 par le groupe de W. ERTMER, alors à l'Université de Bonn (Allemagne) [12], ainsi que par le groupe de V. LORENT de l'Université de Paris-Nord à Villetaneuse, en 1996 [13]. Le groupe de J. DALIBARD au Laboratoire KASTLER–BROSSEL de l'Ecole Normale Supérieure (Paris) réalisa la diffraction d'une onde atomique «dans le temps», en la réfléchissant par un miroir à modulation temporelle [14]. A la différence d'un réseau de diffraction dans l'espace, l'onde atomique reçoit alors des transferts de fréquence (énergie) plutôt que de vecteur d'onde (impulsion).

En somme, nous constatons que le miroir à atomes est un élément de grande fléxibilité de l'optique atomique, et qu'il permet de réaliser à la fois la réflexion et la diffraction d'atomes. Ceci dit, les questions suivantes se posent pour l'opticien :

- Quelle est la réflectivité du miroir ? ou plus précisément : jusqu'à quelle énergie incidente les atomes peuvent-ils être réfléchis ?

- Le miroir est-il dispersif ? Autrement dit : quelle est la phase de l'onde atomique réfléchie, et comment dépend-elle de la longueur d'onde incidente ?

- La réflexion par le miroir est-elle spéculaire ? ou plus précisément : quelle est la limite de résolution angulaire de la réflexion et quelle qualité de surface est requise pour obtenir une réflexion spéculaire plutôt que diffuse ?
- Dans quelle mesure la réflexion par le miroir déforme-t-elle le front d'onde atomique ? La phase de l'onde atomique est-elle suffisamment préservée pour que des franges puissent être observées dans un interféromètre ?
- Quant au réseau de diffraction en réflexion, quelle est la séparation angulaire des ondes atomiques diffractées, et combien d'ordres sont présents dans la figure de diffraction ? Quels sont les paramètres qui déterminent ces quantités ?

Le point de vue de l'opticien dans ce mémoire

Les questions énoncées ci-dessus trouveront leur réponse tout au long de ce mémoire : c'est ainsi qu'à la partie I, où nous étudions la réflexion spéculaire par le miroir, nous nous intéressons d'une part à l'énergie incidente maximale des atomes qui puissent être réfléchis (chapitre 2) et d'autre part à la phase de l'onde atomique après la réflexion (chapitre 3). Dans la partie II, nous développons la théorie de la diffraction par un miroir avec une modulation spatiale. Cette théorie servira dans la partie III à caractériser la réflexion diffuse d'atomes à cause des irrégularités de la surface du miroir (chapitre 15), à la fois du point de vue de la divergence angulaire des atomes diffusés et à l'égard des propriétés de cohérence de la réflexion par le miroir.

2 Le point de vue du physicien atomique

Le physicien se voit tout d'abord devant la charge de préparer un ensemble d'*atomes lents* qui puissent être réfléchis par le miroir. S'il admet que le miroir est caractérisé par une barrière de potentiel, cette barrière aura certainement une hauteur finie ; il faudra donc que les atomes aient une vitesse incidente dont la composante le long de la normale à la surface du miroir ne soit pas trop élevée. Dans la pratique, deux stratégies sont suivies pour remplir cette condition de réflexion : en ordre chronologique, la première utilise un jet d'atomes thermiques, avec une vitesse de l'ordre du millier de mètres par seconde, qui est incident sur le miroir sous un angle rasant. C'est ainsi que le groupe de V. S. LETOKHOV à l'Institut de Spectroscopie de l'Académie des Sciences de Russie (Troitsk) réalisa la première observation de la réflexion d'atomes par une onde évanescente [15, 16]. En incidence rasante, les jets d'atomes incident et réfléchi sont généralement séparés par un angle de quelques milliradians et par conséquent, une bonne collimation du jet est nécessaire, moyennant par exemple des fentes. Dans la suite, la réflexion d'atomes en incidence rasante fut observée par les groupes de T. HÄNSCH de l'Université Ludwig Maximilian à München (Allemagne) [17], de J. BAUDON de l'Université de Paris-Nord à Villetaneuse [18] ainsi que de J. MLYNEK de l'Université de Konstanz (Allemagne) [19, 20].

La deuxième stratégie part d'un ensemble d'atomes qui sont piégés dans un piège magnéto-optique[1] à quelques millimètres au-dessus du miroir. Les atomes tombent sur le miroir dans le champ de pesanteur terrestre, ce qui leur donne une vitesse incidente de l'ordre du mètre par seconde. La première réalisation expérimentale de cette stratégie avec une onde évanescente lumineuse est due au groupe de S. CHU de l'Université de Stanford (Etats-Unis) [22], et le groupe de J. DALIBARD et de C. COHEN-TANNOUDJI de l'Ecole Normale Supérieure a pu observer les atomes rebondir une dizaine de fois sur le miroir [23]. La réflexion par un miroir magnétique d'atomes tombant d'un piège a été rapportée par le groupe de E. HINDS, alors à l'Université de Yale (Etats-Unis) [24], et par le groupe de P. HANNAFORD et de G. I. OPAT de l'Université de Melbourne (Australie) [25].

Nous notons que la réflexion d'atomes qui tombent d'un piège, n'est possible que grâce au refroidissement d'atomes par laser [26, 27, 28, 29, 30, 31] qui permit de réaliser des ensembles d'atomes extrèmement bien caractérisés du point de vue de leur mouvement. Les atomes froids ouvrirent des perspectives entièrement nouvelles pour la physique et l'optique atomiques, et pour ne citer que l'exemple le plus frappant, ils préparèrent le chemin, dans un passé tout récent, vers la réalisation expérimentale de la condensation de BOSE–EINSTEIN dans un gaz d'atomes [32, 33, 34, 35].

Disposant ainsi d'atomes suffisamment lents, regardons de plus près comment une onde évanescente lumineuse permet de réfléchir des atomes. Rappelons que l'onde évanescente est créée lorsqu'un faisceau de lumière subit une réflexion totale interne sur l'interface entre deux milieux diélectriques qui ont des indices de réfraction différents. Le faisceau est incident dans le milieu de plus haut indice, et dans le milieu de faible indice (il s'agit généralement de l'air ou du vide), la lumière se propage parallèlement à l'interface, avec une amplitude qui décroît de façon exponentielle en fonction de la distance à l'interface. Une telle onde évanescente correspond à une «couche de lumière» dont l'épaisseur est d'une fraction de la longueur d'onde optique.

L'ingrédient essentiel pour comprendre l'interaction entre l'atome et l'onde évanescente est le déplacement des niveaux d'énergie atomiques dans un champ lumineux intense avec une fréquence voisine de la résonance atomique. Plus précisément, l'on montre que l'énergie de l'état fondamental de l'atome est augmentée si la fréquence lumineuse se trouve au-dessus de la fréquence de résonance de l'atome. Dans l'onde évanescente, l'intensité du champ lumineux[2] et par conséquent le déplacement lumineux présentent un fort gradient qui repousse l'atome de la surface du diélectrique. Lorsque la saturation de la transition atomique est faible, l'atome reste

[1] Dans un piège magnéto-optique, les atomes sont soumis à des faisceaux lumineux et un champ magnétique quadrupolaire (voir par exemple [21]). Sous l'action conjointe de la pression de radiation, du pompage optique et de l'effet ZEEMAN, un nuage atomique se forme avec une taille de l'ordre du millimètre, où les atomes sont animés d'une vitesse de quelques centimètres par seconde. Ceci correspond à une température de l'ordre du millionième de degré au-dessus du zéro absolu.

[2] Au sens habituel du terme, l'intensité de l'onde évanescente n'existe pas parce que celle-ci n'est pas un mode rayonnant du champ lumineux. Nous utiliserons ici la notion d'intensité dans un sens plus large, pour désigner le module au carré de l'amplitude du champ électrique.

dans son état fondamental et la probabilité d'émission spontanée est négligeable. Le déplacement lumineux joue alors le rôle d'un potentiel mécanique, le *potentiel dipolaire*, qui détermine le mouvement de l'atome par les lois habituelles de la dynamique. En particulier, l'atome est réfléchi si son énergie cinétique incidente (le long de la normale à la surface) est inférieure à la valeur maximale du potentiel dipolaire. Il s'approche de la surface du diélectrique en ralentissant, jusqu'à la distance où le potentiel dipolaire est égale à l'énergie cinétique incidente. A cette position, l'atome rebrousse chemin pour sortir de nouveau de l'onde évanescente. Il reprend son énergie cinétique incidente une fois qu'il est suffisamment loin de la surface que le champ lumineux est négligeable.

En somme, l'onde évanescente crée donc une barrière de potentiel répulsive par laquelle l'atome est réfléchi. Etant donné que la distance du point de rebroussement est de l'ordre d'une fraction de la longueur d'onde optique, le physicien se souviendra cependant que l'interaction de VAN DER WAALS entre l'atome et la surface n'est pas forcément négligeable devant le déplacement lumineux dans l'onde évanescente. L'interaction de VAN DER WAALS provient des fluctuations quantiques du dipôle atomique : celui-ci crée alors un champ électro-magnétique qui est réfléchi par l'interface et interagit de nouveau avec le dipôle [36, 37, 38]. Pour l'état fondamental de l'atome, l'interaction de VAN DER WAALS est attractive et réduit donc la hauteur de la barrière de potentiel. Cette réduction a en effet été observée dans l'expérience du miroir à atomes de notre groupe de l'Institut d'Optique à Orsay [39]. Le potentiel dipolaire du miroir à atomes permit ainsi de sonder l'interaction de VAN DER WAALS avec une précision remarquable : il fut même possible de distinguer entre la limite électrostatique de l'interaction, où l'on néglige le temps fini de propagation du champ électro-magnétique entre l'atome et l'interface, et une théorie plus précise basée sur l'électrodynamique quantique.

Le point de vue du physicien dans ce mémoire (partie I)

Nous ne pouvons pas exposer ici le refroidissement radiatif d'atomes par laser, ce que d'autres ont d'ailleurs fait mieux avant nous : pour ce sujet, il est difficile de ne pas renvoyer le lecteur aux travaux de C. COHEN-TANNOUDJI [40, 28, 29, 30, 41]. Nous ne pouvons que rappeler, au chapitre introductif 1, l'interaction entre un atome et le champ lumineux dans le régime où c'est le potentiel dipolaire qui détermine le mouvement de l'atome. Dans la partie I de ce mémoire, nous étudions la barrière de potentiel du miroir à atomes (chapitre 2), avec une brève description de l'influence de l'interaction de VAN DER WAALS. Dans la suite de la première partie, nous considérons un potentiel simplifié avec une forme exponentielle qui modélise la réflexion d'un atome dont le point de rebroussement est loin du sommet de la barrière de potentiel. Le potentiel exponentiel est suffisamment simple pour permettre des solutions analytiques pour les fonctions d'onde atomiques. A l'aide de ces solutions, nous étudions le déphasage à la réflexion par le miroir (chapitre 3), ainsi que la réflexion par un potentiel attractif pour lequel aucune réflexion n'est possible d'un point de vue classique (chapitre 4).

En ce qui concerne les parties II et III sur la diffraction et la réflexion diffuse, donnons encore la parole au physicien.

Interlude à deux : diffraction d'atomes

Pour décrire le mouvement d'un atome dans l'onde évanescente stationnaire qui réalise un réseau de diffraction en réflexion, le physicien sera tenté de procéder par analogie à la diffraction par une onde stationnaire lumineuse en transmission. Dans ce contexte, la diffraction d'atomes s'appelle également «effet KAPITZA–DIRAC quasi-résonnant» et des efforts considérables ont été consacrés à son étude [42, 43, 44, 45, 40, 46, 28, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53]. L'on peut interpréter la diffraction de l'atome par des cycles d'absorption et d'émission stimulée de photons des deux ondes lumineuses qui forment l'onde stationnaire : lorsque l'atome absorbe un photon d'une onde et en émet un autre dans l'autre onde, il échange une quantité de mouvement de deux impulsions de photon le long de la direction parallèle à l'onde stationnaire. Dans l'onde évanescente cependant, les «photons» ont des propriétés particulières parce que d'une part, ils se propagent le long de l'interface avec un vecteur d'onde plus grand que le vecteur d'onde optique dans le vide et d'autre part, ils présentent un profil d'intensité dans la direction perpendiculaire à l'interface qui est beaucoup plus raide que celui d'une onde lumineuse se propageant dans le vide. L'analogie entre les deux ondes stationnaires lumineuses ne semble donc pas si simple. La faible «épaisseur» de l'onde évanescente stationnaire pourrait encore faire naître l'idée de la rapprocher d'un réseau de diffraction «mince» où l'on suppose que c'est seulement dans la direction parallèle au pas du réseau que l'échange de la quantité de mouvement a lieu, alors que dans la direction perpendiculaire au pas du réseau (la direction longitudinale), le mouvement de l'atome n'est pas modifié. (Dans l'optique atomique, cette approximation est associée aux noms de RAMAN et NATH [45].[3]) Mais le physicien hésitera de nouveau parce que dans l'onde évanescente, la trajectoire de l'atome a une forme complexe, étant donné qu'elle présente un point de rebroussement ; en outre, il ne paraît pas évident de décrire l'échange de photons entre l'atome et l'onde évanescente stationnaire alors que la longueur d'onde atomique semble devenir infinie au point de rebroussement.

Peut-être une collègue pourra-t-elle aider notre physicien à vaincre quelques-unes de ses inquiétudes : la collègue qui étudie la réflexion et diffraction d'atomes par des surfaces cristallines «nues» (sans onde évanescente) [55, 6]. Il s'agit dans ce domaine de la physique certes d'atomes avec une énergie beaucoup plus élevée que celle des atomes lents réfléchis par l'onde évanescente, mais par ailleurs, l'on y rencontre des problèmes analogues : comme les atomes ne peuvent pénétrer dans le cristal, sa surface correspond à une barrière de potentiel sur laquelle les atomes se réfléchissent ; et pour

[3] RAMAN et NATH l'ont développée pour la diffraction de la lumière par une onde acoustique stationnaire, voir au chap. XII de M. BORN et E. WOLF, *Principles of Optics* (Pergamon Press, 1959).

interpréter par exemple la diffraction, l'on fait appel à un échange de « phonons », c'est-à-dire des ondes de son de la surface cristalline. La collègue de la physique des surfaces peut alors faire part à notre physicien d'une théorie sexagénaire de la diffusion des ondes de matière par une surface cristalline : les premières contributions remontent aux années trente de notre siècle, peu après la naissance de la mécanique quantique, elles sont dues, entre autres, au groupe de J. E. LENNARD-JONES [56, 57]. Dans cette théorie, l'interaction entre l'atome et la surface ressemble à une collision que l'on peut décrire par une approche perturbative similaire à l'approximation de BORN, à la différence que les fonctions d'onde non perturbées ne sont pas des ondes planes, mais qu'elles décrivent la réflexion spéculaire par une surface parfaitement plane. Notre physicien atomique sort donc rassuré de la rencontre avec la collègue de la physique des surfaces : une telle analogie jette en effet un peu plus de lumière sur la description théorique de l'onde évanescente stationnaire en tant que réseau de diffraction d'atomes en réflexion.

Les points de vue des deux physiciens dans ce mémoire (partie II)

Après avoir obtenu, à la partie I, les fonctions d'onde atomiques pour la réflexion spéculaire par une onde évanescente simple, nous nous tournons dans la partie II vers la diffraction par une onde évanescente stationnaire. Le chapitre central en est le chapitre 7 qui présente une approche perturbative à l'aide de l'approximation de BORN où nous utilisons les fonctions d'onde pour la réflexion spéculaire comme solutions non perturbées. D'après la physicienne des surfaces, cette approche s'appelle l'« approximation de BORN à partir d'ondes déformées » (*distorted wave* BORN *approximation*) [58] parce que ses solutions à l'ordre zéro ne sont pas des ondes planes. Le chapitre 7 permet d'identifier des régimes physiques différents pour lesquels nous présenterons, aux chapitres 8 à 11, des approches particulières pour aller au-delà de la limite perturbative.

Interlude à trois : réflexion diffuse

La rencontre entre les deux physiciens soulève maintenant une question de la part de la physicienne des surfaces : elle sait bien, elle, que les surfaces ne sont jamais parfaitement planes, et qu'elles présentent de la rugosité avec des variations de hauteur au moins de l'ordre de l'Ångström, étant donné que ce sont des atomes individuels qui la composent. Les deux iront poser la question à l'opticien en ce qui concerne les surfaces diélectriques : oui, les meilleurs polis ont en effet une rugosité résiduelle de cet ordre de grandeur [59, 60, 61]. Quelle est donc l'influence de ces irrégularités sur le miroir à atomes et sur la spécularité de la réflexion atomique ? Le physicien doit avouer que les atomes incidents sur le miroir à onde évanescente ont une longueur d'onde de quelques dizaines d'Ångström, ce qui n'est pas si loin de la rugosité du diélectrique. Mais il se posera la question : les défauts de surface peuvent-ils vraiment être d'une influence importante pour un atome qui rebrousse chemin à une distance de l'ordre de la longueur d'onde optique, soit à des milliers d'Ångströms ? Les deux physiciens sont encore dans l'atelier de l'opticien lorsque celui-ci intervient en rappelant que le champ proche au-dessus d'une surface diélectrique retrace en effet le profil de la surface : c'est ainsi que dans la microscopie optique à effet tunnel, l'on a accès à la topographie de la surface, en mesurant le champ proche avec la pointe d'une fibre optique [62, 63, 64, 65]. Ayant entendu cette remarque et se souvenant que la barrière de potentiel du miroir à atomes est en effet donnée par l'intensité du champ lumineux au-dessus de la surface, le physicien n'est plus très loin de réaliser que la barrière de potentiel du miroir à atomes n'est pas parfaitement plane. La réflexion d'atomes peut donc devenir diffuse, et en effet, ceci a été observé récemment par notre groupe à Orsay [66].

Les points de vue des trois collègues dans le présent mémoire (partie III)

La réflexion diffuse d'atomes par le miroir à atomes représente le sujet de la partie III de ce mémoire. Nous proposons au chapitre 15 des mécanismes physiques qui induisent une interaction entre l'atome et la surface rugueuse du diélectrique, et nous caractérisons la distribution angulaire des ondes atomiques réfléchies. Nous étudions en particulier dans quelle mesure la réflexion diffuse d'atomes donne des renseignements sur la rugosité de surface du diélectrique. En ce qui concerne le miroir à atomes en tant qu'élément de l'optique atomique, cette partie III contribue à préciser les contraintes sur les surfaces utilisées dans l'expérience si l'on veut que la réflexion par le miroir soit « la plus spéculaire » possible.

3 Le point de vue du « mécanicien quantique »

Présentons maintenant le plan du présent mémoire, avec une attention particulière pour les approches théoriques que nous avons suivies.

Partie I : la réflexion spéculaire

Une fois que nous avons adopté une description de l'interaction entre l'atome et le champ lumineux en termes du potentiel dipolaire (au chapitre 1.1), la réflexion d'atomes se réduit à un problème élémentaire de la mécanique quantique : la solution de l'équation de SCHRÖDINGER pour une barrière de potentiel répulsive (chapitre 2). Pour le « mécanicien quantique », la réflexion est alors entièrement caractérisée par le déphasage de l'onde réfléchie.[4] Le potentiel dipolaire de l'onde évanescente le met

[4] A. MESSIAH, *Mécanique Quantique* (Dunod, Paris, nouvelle édition 1995), tome 1, chap. X.

en outre dans la situation heureuse que la barrière de potentiel est d'une forme particulièrement simple (une fonction exponentielle) qui permet de trouver des solutions analytiques explicites à l'équation de SCHRÖDINGER (au chapitre 3). Les premiers à les écrire furent J. M. JACKSON et N. F. MOTT en 1932 [68].[5] Ayant à notre disposition une solution complète du problème de la réflexion, nous pouvons étudier deux situations limites : il s'agit des régimes semi-classique et quantique où la longueur d'onde de l'onde atomique incidente est soit très petite, soit très grande devant la longueur caractéristique du potentiel exponentiel.[6] Dans la limite semi-classique, la solution analytique exacte permet de retrouver le résultat donnée par l'approximation BKW [67] : l'on peut alors obtenir la phase de l'onde réfléchie en intégrant l'impulsion le long de la trajectoire classique réfléchie par le potentiel. Dans la limite quantique par contre, la barrière de potentiel varie rapidement à l'échelle de la longueur d'onde incidente. L'on obtient alors une bonne approximation du déphasage à la réflexion en remplaçant le potentiel exponentiel par une barrière de potentiel infinie. Dans cette limite, il est même possible d'observer la réflexion d'une onde atomique, avec un coefficient de réflexion non nul, par un potentiel exponentiel *attractif* sur lequel aucune réflexion ne se produit d'un point de vue classique (chapitre 4). Tels sont les résultats de la première partie de ce mémoire où nous nous limitons au problème simple d'une barrière de potentiel de forme exponentielle.

Partie II : la diffraction

Du point de vue de la mécanique quantique, la diffraction d'atomes par une onde évanescente stationnaire se présente dans le cadre suivant : il est nécessaire de décrire l'atome par une approche ondulatoire pour que la notion de diffraction ait un sens. Le champ lumineux par contre n'intervient qu'à travers le potentiel dipolaire que nous pouvons décrire par un potentiel externe indépendant du temps, comme dans la théorie quantique de la diffusion. L'onde atomique est diffractée parce que le potentiel externe lui transfère des vecteurs d'onde, tout en respectant la conservation de l'énergie. Il s'ensuit que le « mécanicien » développera une théorie de la diffraction d'atomes par l'onde évanescente stationnaire, dans laquelle il n'y a pas de « photons » (parce que le champ lumineux n'est pas quantifié).

Nous ferons encore une concession au mécanicien et à son souci de simplification, en présentant d'abord, au chapitre 7, un étude perturbative de la diffraction. Nous

[5] JACKSON et MOTT étudièrent alors l'échange d'énergie à l'interface entre un gaz et un solide.

[6] Dans ce mémoire, nous utilisons l'adjectif « semi-classique » dans le sens précisé ci-dessus. Notons qu'il existe un usage différent du mot « semi-classique » dans le contexte du refroidissement radiatif, où l'on considère un atome avec une position et une vitesse bien définies et dont on décrit de façon quantique la dynamique des états internes. Dans ce contexte-là, le mouvement du centre de masse de l'atome est décrit de façon *classique*, il n'y a pas de fonction d'onde « externe ». Si par contre le mouvement externe de l'atome est quantifié, l'on se sert par exemple des « équations de BLOCH optiques *généralisées* » ou des « fonctions d'onde Monte Carlo ». Ces approches ne sont pas nécessaires ici parce qu'en négligeant l'émission spontanée, il est justifié de décrire l'atome par une fonction d'onde (un « état pur »).

considérerons une onde évanescente stationnaire avec une faible composante contra-propageante. Le potentiel dipolaire contient alors une partie avec une modulation spatiale, superposée sur un potentiel non modulé. L'approche perturbative consiste à traiter la partie modulée du potentiel comme une perturbation, dans l'approximation de BORN à partir d'ondes déformées. Il s'avère que le point de rebroussement de l'atome ne présente pas de problème lorsque l'on prend les fonctions d'ondes exactes pour la réflexion spéculaire comme point de départ dans le développement perturbatif : celles-ci varient en effet de façon régulière autour du point de rebroussement.

Les résultats principaux de la théorie de diffraction perturbative sont les suivants : d'une part, dans le régime semi-classique et au voisinage de l'incidence normale, il suffit d'une onde évanescente avec une faible composante stationnaire pour exciter les premiers ordres de diffraction non spéculaires. L'onde atomique présente donc une grande sensibilité aux variations spatiales du potentiel dipolaire du miroir à atomes. D'autre part, dans la direction perpendiculaire à la surface du miroir, la différence du vecteur d'onde de l'onde atomique diffractée par rapport à une réflexion spéculaire, est au plus de l'ordre de la constante de décroissance caractéristique de l'onde évanescente. Ceci implique que dans le régime semi-classique, la composante normale du vecteur d'onde atomique est quasiment conservée, à une réflexion spéculaire près. Par conséquent, le potentiel dipolaire ne peut transférer le vecteur d'onde nécessaire à la conservation de l'énergie en incidence oblique et rasante, et la diffraction devient alors inefficace.

Mais le physicien voudra aller plus loin que l'approximation de BORN qui est limitée au calcul des premiers ordres de diffraction non spéculaires. Nous mettrons ici en relief deux parmi les quatre approches que nous présentons à cet effet : l'« approximation du réseau de phase mince » (chapitre 8) et la « diffraction assistée par structure interne » (chapitre 11).

L'*approximation du réseau de phase mince* est développée au chapitre 8. Elle s'appuie sur le fait que les expériences de miroir à atomes se situent généralement dans le régime semi-classique où la longueur d'onde atomique est faible devant les échelles caractéristiques du potentiel.[7] Nous choisissons alors une position de départ différente : au lieu de résoudre l'équation de SCHRÖDINGER, nous nous plaçons dans la limite semi-classique de la formulation de la mécanique quantique dans l'intégrale de FEYNMAN [69, 70, 71, 72]. La phase de la fonction d'onde s'obtient alors au moyen de l'intégrale d'action[8] que l'on calcule le long d'une trajectoire classique. Cette approche généralise l'approximation BKW à un nombre arbitraire de dimensions. En op-

[7] Nous voudrions souligner que dans l'approximation du réseau de phase mince, l'extension du réseau n'est pas faible devant la longueur atomique, bien que le qualificatif « mince » puisse le suggérer. Le contraire est le cas, étant donné que l'on se place dans le régime semi-classique. C'est la forme des trajectoires classiques dans le réseau qui détermine si celui-ci est « mince ».

[8] L'intégrale d'action est une quantité empruntée au formalisme lagrangien de la mécanique classique dont nous rappelons les principes au chapitre 1.2.1. Dans ce contexte, les trajectoires classiques sont déterminées par un principe variationnel, le « principe de moindre action » : ce sont elles qui minimisent l'action.

tique lumineuse, une approche analogue correspond à l'optique géométrique[9], où l'on calcule la phase du champ lumineux à l'aide du chemin optique le long des rayons géométriques. A partir de ce cadre théorique, nous développons une approche perturbative où ce n'est pas la fonction d'onde qui fait l'objet d'un développement perturbatif, comme dans l'approximation de BORN, mais plutôt sa phase. L'on peut alors interpréter la diffraction de l'onde atomique par une modulation de phase spatiale que lui impose le réseau de diffraction. Pour une amplitude de modulation de phase plus grande que l'unité, plusieurs ordres sont présents dans la figure de diffraction. En optique lumineuse, une approche équivalente est utilisée pour la diffraction par des réseaux de phase minces, et c'est pour cette raison que nous avons choisi le nom d'«approximation du réseau de phase mince». Comme l'a montré C. COHEN-TANNOUDJI [71, 72], cette approximation peut servir de façon plus générale à calculer le déphasage de la fonction d'onde atomique lorsque l'atome est soumis à un potentiel faible, un problème qui se pose fréquemment dans l'interférométrie. La physicienne des surfaces connaîtra une approximation équivalente sous le nom de «*trajectory approximation*», dont les premiers traces remontent à J. L. BEEBY [73] et qui a été développée dans les groupes de A. C. LEVI de l'Université de Genova (Italie) [74], de P. TOENNIES du *Max-Planck-Institut für Strömungsforschung* à Göttingen (Allemagne) [75], de D. M. NEWNS de l'Imperial College à London (Grande-Bretagne) [76] et de W. BRENIG de l'Université Ludwig Maximilian à München (Allemagne) (voir [77]).

Au chapitre 11, nous ferons appel à la structure interne de l'atome pour interpréter *la diffraction d'atomes en incidence rasante*. Historiquement, il s'agit là de la première approche expérimentale à la diffraction, et nous devons confronter la théorie aux observations expérimentales des groupes de W. ERTMER à Bonn et de V. LORENT à Paris-Nord [12, 13]. L'approche du potentiel dipolaire se trouve en difficultés pour expliquer la diffraction en incidence rasante, parce qu'elle interdit, à cause de la quasi-conservation de la composante normale du vecteur d'onde atomique, les transferts de vecteur d'onde entre les ordres de diffraction qui sont imposés par la conservation de l'énergie. Nous présentons donc des théories de diffraction alternatives qui ont été développées pour le cas de l'incidence rasante par R. DEUTSCHMANN, W. ERTMER et H. WALLIS de l'Université de Bonn [78, 79]. En comparant la théorie aux observations expérimentales, nous soulignons que la diffraction est seulement possible si elle fait intervenir des transitions entre les sous-niveaux magnétiques de l'état fondamental atomique. Une telle conclusion a déjà été présentée par le groupe de C. M. SAVAGE de l'Université Nationale d'Australie (Canberra), moyennant une solution numérique de l'équation de SCHRÖDINGER dépendante du temps [80, 81].

[9] Nous utiliserons dans ce mémoire la notion d'«optique géométrique» dans un sens un peu large, en y incorporant la notion de la *phase* du champ lumineux. Le long d'un rayon de l'optique géométrique habituelle, la phase est donnée par le chemin optique, en divisant par la longueur d'onde lumineuse.

Partie III : la réflexion diffuse

Dans la partie III de ce mémoire, le «mécanicien quantique» se voit confronté à l'observation expérimentale qu'en incidence normale, la réflexion d'atomes par le miroir à onde évanescente est plutôt diffuse que spéculaire [66]. Etant convaincu par le physicien et l'opticien que le champ lumineux présente des irrégularités qui sont dues à la rugosité de la surface du diélectrique, il choisira une approche statistique à la rugosité ainsi qu'à la réflexion diffuse (chapitres 13 et 14). Par cette approche, nous traduisons notre ignorance de la forme détaillée du profil de la surface rugueuse, et nous nous limitons à prédire des valeurs moyennes par rapport à un ensemble de réalisations indépendantes de la surface. En optique, une théorie analogue est suivie pour caractériser la diffusion de la lumière par une surface rugueuse[10] ; dans la diffraction d'atomes par des surfaces cristallines, il faut introduire un tel cadre pour tenir compte du mouvement thermique de la surface [83, 84]. Nous introduisons au chapitre 14 deux notions centrales pour caractériser la réflexion diffuse atomique : la distribution angulaire moyenne des atomes réfléchis, ainsi que leur fonction de cohérence. Bien qu'elles contiennent une information équivalente, ces notions décrivent des situations physiques différentes : la distribution angulaire correspond à une expérience de diffusion, comme celle d'Orsay [66], alors que la fonction de cohérence est mesurée par un dispositif interférométrique, comme par exemple l'interféromètre atomique qui a été réalisé par le groupe de J. DALIBARD à Paris [85], où les atomes sont réfléchis plusieurs fois par le miroir à onde évanescente.

Aux chapitres 15 et 16, nous présentons les mécanismes physiques d'interaction entre l'atome et la surface rugueuse qui rendent diffuse la réflexion des atomes. Nous considérons d'abord les «potentiels rugueux» au voisinage de la surface (chapitre 15) et ensuite le potentiel dipolaire du champ lumineux diffus dans le demi-espace au-dessus de la surface (chapitre 16). En particulier, nous étudions dans quelle mesure la réflexion diffuse d'atomes permet d'obtenir des renseignements sur le profil de la surface rugueuse. La diffusion d'atomes lents représenterait une application intéressante du miroir à atomes qui permettrait de caractériser la qualité d'une surface diélectrique, à l'échelle de la longueur d'onde atomique et ce de façon non déstructive.

L'organisation du mémoire

Etant conscient de la complexité du présent mémoire, nous voudrions proposer au lecteur quelques pistes pour orienter sa lecture. Dans les graphiques 1 à 3 suivants, les encadrés correspondent aux chapitres centraux, et les notions importantes sont notées à droite en caractères italiques.

[10] M. NIETO-VESPERINAS, *Scattering and Diffraction in Physical Optics* (Wiley, 1991), chap. 7.

Partie I
Reflexion speculaire

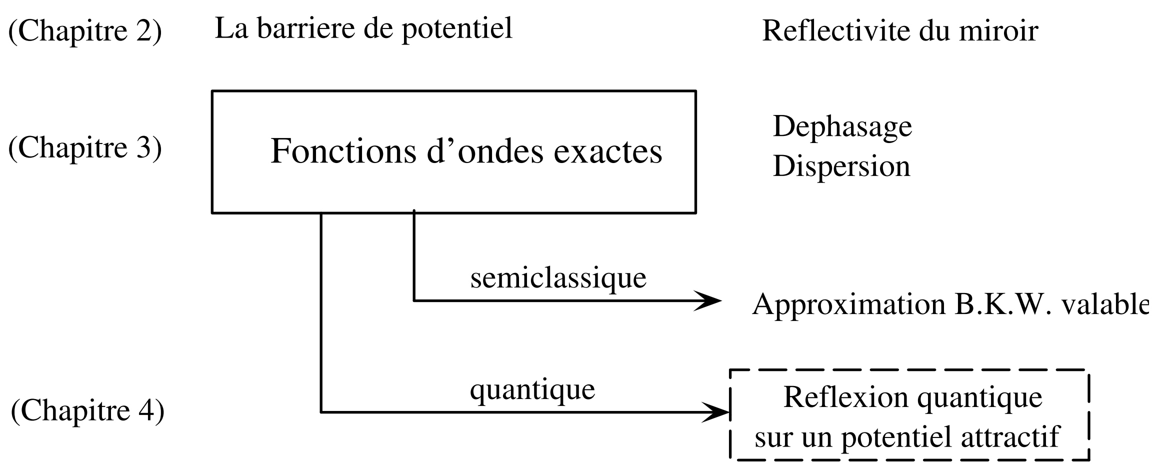

Figure 1: Organigramme de la partie I : réflexion spéculaire.

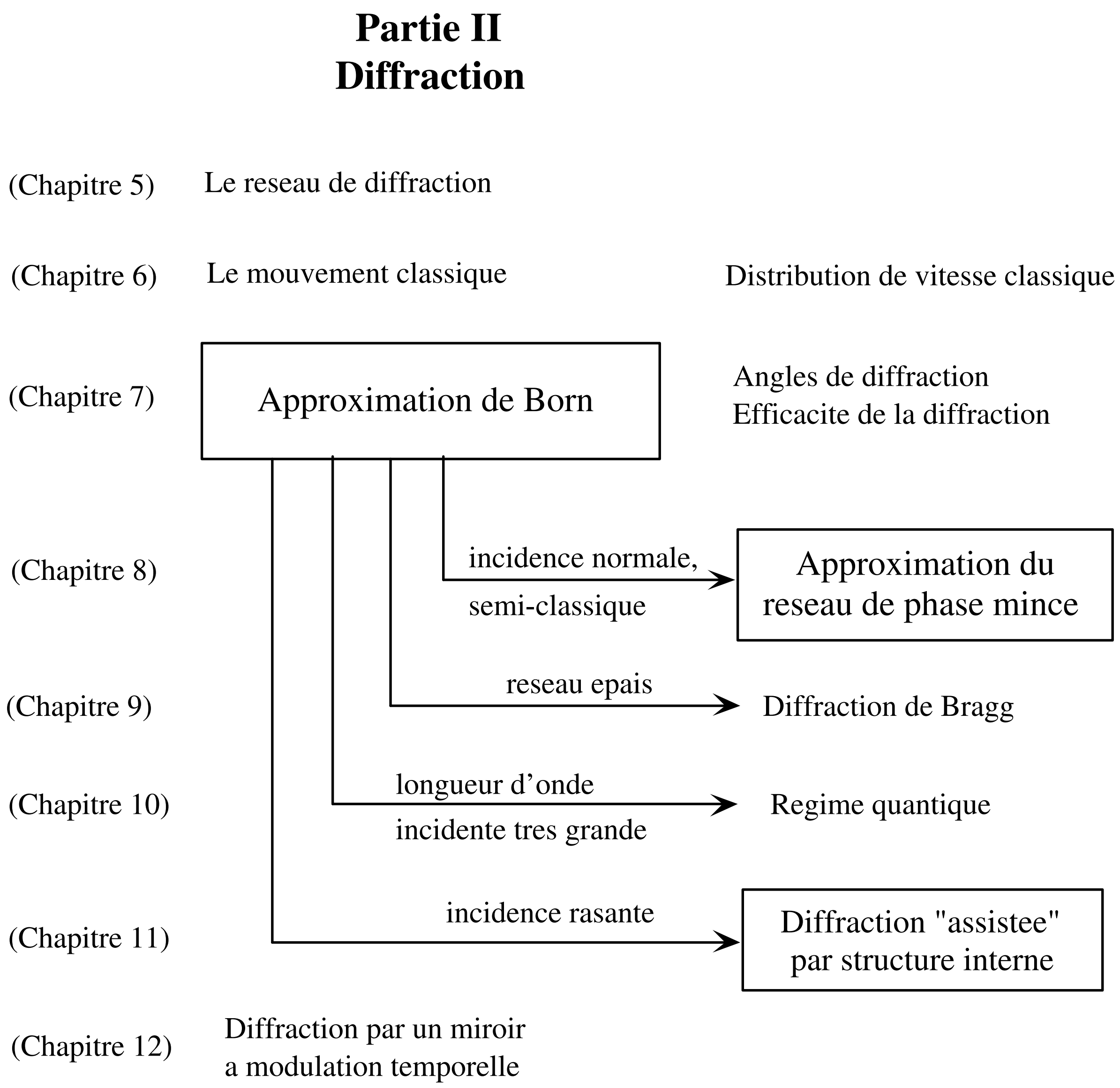

Figure 2: Organigramme de la partie II : diffraction.
Les chapitres les plus proches des expériences de diffraction d'atomes par l'onde évanescente stationnaire sont le chapitre 8 pour une incidence au voisinage de la normale et le chapitre 11 pour l'incidence rasante.

Partie III
Reflexion diffuse

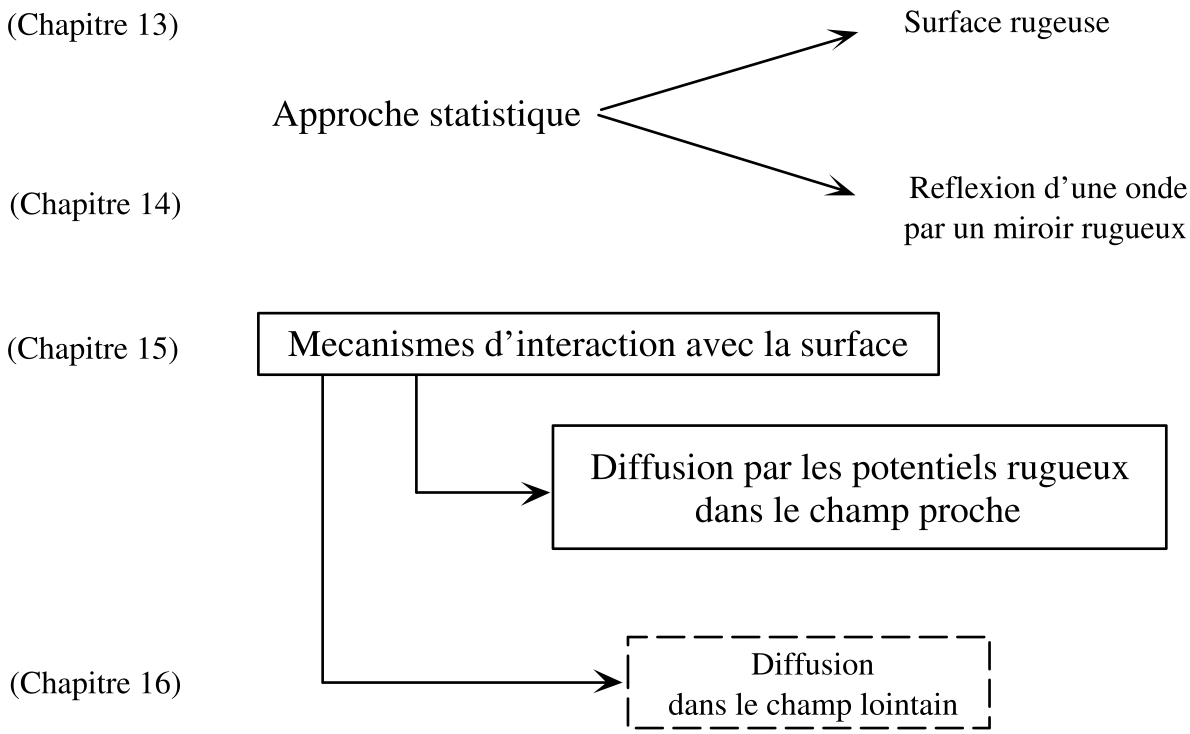

Figure 3: Organigramme de la partie III : réflexion diffuse.
Le chapitre 15 utilise l'approximation de BORN *(Chap. 7). Les chapitres 15 et 16 utilisent l'approximation du réseau de phase mince (Chap. 8).*

Chapitre 1

Atome à un niveau : description quantique du mouvement

Nous rassemblons dans ce chapitre quelques outils théoriques pour décrire l'interaction entre l'atome et le champ lumineux de l'onde évanescente. Dans un premier temps, nous rappelons l'expression du potentiel dipolaire et ses conditions de validité. Nous l'identifions ensuite avec un potentiel mécanique qui détermine le mouvement du centre de masse d'un atome. Dans le deuxième sous-chapitre, les descriptions classique et quantique du mouvement sont passées en revue.

1.1 Interaction atome–lumière dans la limite de faible saturation

1.1.1 L'interaction dipolaire électrique

Nous rappelons dans ce paragraphe l'interaction dipolaire électrique et l'approximation du champ tournant pour un atome à deux niveaux.

Le Hamiltonien d'interaction $V_{\mathrm{AL}}(\mathbf{r})$ entre un atome et un champ lumineux est donné par l'interaction dipolaire électrique :

$$\hat{V}_{\mathrm{AL}}(\mathbf{r},t) = -\mathbf{D}\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r},t), \tag{1.1}$$

où $\mathbf{D}$ est le moment dipolaire électrique de l'atome et $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ le champ électrique[1] à la position $\mathbf{r}$ de l'atome. Nous décrirons dans ce mémoire le champ électrique par un champ classique et externe, en ignorant ses fluctuations quantiques. Le champ est

[1]Le champ électrique $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ dans (1.1) correspond à la partie transverse de l'induction électrique, au facteur ε_0 près, voir la transformation de POWER–ZIENAU–WOOLLEY au chapitre IV.C. de C. COHEN-TANNOUDJI, J. DUPONT-ROC et G. GRYNBERG, *Photons et atomes — Introduction à l'électrodynamique quantique* (InterEditions, Paris, 1987). Cette distinction n'est néanmoins pas nécessaire pour l'interaction avec un champ lumineux externe qui lui est toujours transverse.

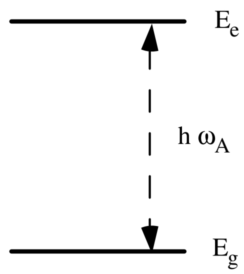

Figure 1.1: Atome à deux niveaux d'énergie E_g et E_e, séparés par $\hbar\omega_A$.

supposé monochromatique, avec la dépendance temporelle

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_L t} + \mathbf{E}^*(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_L t}, \tag{1.2}$$

où $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ est l'amplitude complexe du champ et ω_L sa pulsation[2]. Le moment dipolaire $\mathbf{D}$ est un opérateur hermitien qui agit sur les états internes de l'atome. Etant donné qu'il est impair[3], ses éléments de matrice sont non nuls seulement entre des états internes différents. Nous nous limitons à deux états, $|g\rangle$ et $|e\rangle$, que nous appelerons les états fondamental et excité (voir la figure 1.1). Leurs énergies sont notées E_g et $E_e = E_g + \hbar\omega_A$, où ω_A est la fréquence de transition atomique. Dans le sous-espace de ces deux états internes, l'opérateur du moment dipolaire admet le développement

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^+\,|e\rangle\langle g| + \mathbf{D}^-\,|g\rangle\langle e|. \tag{1.3}$$

L'opérateur $\mathbf{D}^+$ est appelé la «partie montante» de l'opérateur dipolaire parce qu'en agissant sur l'état fondamental $|g\rangle$, il le transforme en état excité. De façon analogue, $\mathbf{D}^- = (\mathbf{D}^+)^\dagger$ en est la partie descendante.

Du point de vue quantique, l'atome est décrit par les amplitudes de probabilité $\psi_{g,e}(\mathbf{r},t)$ pour les états fondamental et excité. Le couplage au champ lumineux se traduit alors par la matrice suivante

$$\hat{V}_{\mathrm{AL}}(\mathbf{r},t)\begin{pmatrix}\psi_e\\ \psi_g\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & -dE(\mathbf{r},t)\\ -dE(\mathbf{r},t) & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_e\\ \psi_g\end{pmatrix}, \tag{1.4}$$

dont les éléments proviennent du couplage par l'interaction dipolaire électrique (1.1)

$$-dE(\mathbf{r},t) = -\langle e|\mathbf{D}^+\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r},t)|g\rangle = -\langle g|\mathbf{D}^-\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r},t)|e\rangle, \tag{1.5}$$

avec d le moment dipolaire électrique réduit. Un atome à deux niveaux interagit donc avec un champ électrique *scalaire* $E(\mathbf{r},t)$ qui correspond généralement à une composante de polarisation du champ lumineux.

[2]Par abus de langage, nous utiliserons le mot «fréquence» au lieu de «pulsation» pour ω_L bien que, au sens stricte, la fréquence lumineuse soit donnée par $\omega_L/2\pi$.

[3]D'un point de vue microscopique, $\mathbf{D}$ est la somme sur les moments dipolaires $q_\alpha\mathbf{x}_\alpha$ des charges q_α qui constituent l'atome, avec $\mathbf{x}_\alpha$ leurs positions par rapport à centre de masse $\mathbf{r}$.

L'approximation résonnante

Sous l'influence du champ lumineux, l'amplitude de l'état excité commence à osciller à la fréquence ω_L imposée par le champ, $\psi_e(\mathbf{r},t) \propto \exp(-\mathrm{i}\omega_L t)$. L'on introduit alors des amplitudes lentement variables $\bar\psi_{g,e}$ en passant dans le «repère tournant»,

$$\begin{array}{rcl} \psi_e(\mathbf{r},t) & = & \bar\psi_e(\mathbf{r},t)\exp[-\mathrm{i}(E_g+\hbar\omega_L)t/\hbar]\,, \\ \psi_g(\mathbf{r},t) & = & \bar\psi_g(\mathbf{r},t)\exp[-\mathrm{i}E_g t/\hbar]\,. \end{array} \tag{1.6}$$

Les couplages de la matrice (1.4) se transforment alors de la façon suivante

$$dE(\mathbf{r},t) \quad\mapsto\quad dE(\mathbf{r},t)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_L t} = dE(\mathbf{r}) + dE^*(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega_L t}. \tag{1.7}$$

L'on néglige maintenant le deuxième terme dans cette somme qui évolue à une fréquence beaucoup plus élevée que le premier :

$$dE(\mathbf{r}) + dE^*(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega_L t} \cong dE(\mathbf{r}). \tag{1.8}$$

L'approximation (1.8) est appelée l'«approximation du champ tournant» (*rotating wave approximation*) pour des raisons historiques.[4] Un nom plus transparent serait l'«approximation résonnante» pour la raison suivante : pour coupler l'état fondamental $|g\rangle$ à l'état excité $|e\rangle$, il faut fournir une énergie $\hbar\omega_A$ à l'atome et donc augmenter la fréquence de l'onde atomique. Cependant, c'est seulement la "partie de fréquence positive" du champ électrique (1.2), $\mathbf{E}(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_L t}$, qui augmente la fréquence de l'onde atomique. Pour ω_L proche de la fréquence de résonance ω_A, c'est donc elle qui couple l'état $|g\rangle$ de façon quasi-résonnante à l'état $|e\rangle$. Par contre, la partie de fréquence négative du champ, $\mathbf{E}^*(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_L t}$, est désaccordée d'environ $2\omega_L$ par rapport à la résonance atomique. La condition de validité de l'approximation résonnante est donc

$$|\Delta| \ll \omega_A, \tag{1.9}$$

où nous avons introduit le *désaccord à résonance* Δ, avec

$$\Delta \equiv \omega_L - \omega_A. \tag{1.10}$$

Dans l'approximation résonnante, le couplage au champ lumineux (1.8) devient indépendant du temps. En effet, l'équation de SCHRÖDINGER pour les amplitudes $\bar\psi_g(\mathbf{r},t)$ et $\bar\psi_e(\mathbf{r},t)$ s'écrit maintenant

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\bar\psi_e\\ \bar\psi_g\end{pmatrix} = \hat T\begin{pmatrix}\bar\psi_e\\ \bar\psi_g\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\hbar\Delta & dE(\mathbf{r})\\ dE^*(\mathbf{r}) & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar\psi_e\\ \bar\psi_g\end{pmatrix}, \tag{1.11}$$

[4]Dans le contexte de la résonance magnétique nucléaire, un moment magnétique nucléaire interagit, par l'interaction dipolaire magnétique, avec un champ magnétique oscillant à une fréquence proche de la fréquence de précession du moment magnétique. La transformation (1.6) correspond alors au passage dans un repère qui tourne à la fréquence d'oscillation du champ magnétique. L'approximation (1.8) consiste à ne retenir que la composante du champ qui est statique dans ce repère.

où $\hat{T} = -(\hbar^2/2M)\nabla^2$ est l'opérateur de l'énergie cinétique. A cause de la transformation (1.6), les deux niveaux $|g\rangle$ et $|e\rangle$ sont séparés en énergie par le désaccord $\hbar\Delta$. Pour Δ positif (un désaccord «bleu»), l'état excité se trouve en-dessous de l'état fondamental.

1.1.2 Le potentiel dipolaire

Mise à part l'approximation résonnante, l'équation de SCHRÖDINGER (1.11) est une équation exacte. Nous allons nous placer dans ce mémoire dans le régime de faible saturation où il est justifié de la simplifier de façon à faire disparaître l'état excité.

Elimination adiabatique de l'état excité

Plus précisément, nous supposons que l'énergie d'interaction est faible devant le désaccord:

$$|V_{\mathrm{AL}}(\mathbf{r}, t)| \ll \hbar\Delta. \tag{1.12}$$

Dans l'équation de SCHRÖDINGER (1.11), le champ lumineux induit alors un couplage entre les états fondamental et excité qui est faible par rapport à leur séparation en énergie. Pour cette raison, l'on appelle aussi le régime (1.12) celui du couplage faible.

L'équation de SCHRÖDINGER pour l'état excité s'écrit

$$\mathrm{i}\hbar\,\partial_t\,\bar{\psi}_e = \hat{T}\,\bar{\psi}_e - \hbar\Delta\,\bar{\psi}_e - dE(\mathbf{r})\,\bar{\psi}_g. \tag{1.13}$$

Nous supposons pour l'instant que l'énergie cinétique est également faible devant le désaccord $\hbar\Delta$. (Cette condition sera relaxée au paragraphe suivant.) L'élimination adiabatique de l'état excité que nous allons justifier dans un instant, consiste à résoudre l'équation (1.13) de la façon suivante :

$$\bar{\psi}_e(\mathbf{r}, t) \simeq -\frac{dE(\mathbf{r})}{\hbar\Delta}\bar{\psi}_g(\mathbf{r}, t). \tag{1.14}$$

Avec cette solution, l'évolution de l'état excité est donc pilotée par celle de l'état fondamental. En reportant l'expression pour l'état excité dans l'équation de SCHRÖDINGER pour le fondamental, nous obtenons

$$\mathrm{i}\hbar\,\partial_t\,\bar{\psi}_g = \hat{T}\,\bar{\psi}_g + V(\mathbf{r})\,\bar{\psi}_g. \tag{1.15}$$

Il apparaît ici une énergie potentielle $V(\mathbf{r})$ donnée par

$$V(\mathbf{r}) = \frac{d^2}{\hbar\Delta}|E(\mathbf{r})|^2. \tag{1.16}$$

Ce potentiel est l'expression approchée du *potentiel dipolaire* à la limite de faible saturation. On l'appelle également le déplacement lumineux parce qu'il modifie l'énergie de l'état fondamental d'un atome éclairé par un champ lumineux. Pour un désaccord positif, le potentiel dipolaire $V(\mathbf{r})$ repousse un atome des régions de forte intensité lumineuse.

Pour justifier la solution adiabatique (1.14), nous notons que l'équation différentielle (1.13) pour l'état excité, sans l'énergie cinétique, admet la solution suivante

$$\begin{aligned}\bar{\psi}_e(\mathbf{r},t) &= -\frac{dE(\mathbf{r})}{\hbar\Delta}\bar{\psi}_g(\mathbf{r},t) + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Delta t_i}\frac{dE(\mathbf{r})}{\hbar\Delta}\bar{\psi}_g(\mathbf{r},t_i) + \\ &\quad + \frac{dE(\mathbf{r})}{\hbar\Delta}\int_{t_i}^{t}\mathrm{d}t'\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Delta(t-t')}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}\bar{\psi}_g(\mathbf{r},t'),\end{aligned} \tag{1.17}$$

avec la condition initiale que l'amplitude $\bar{\psi}_e$ s'annule pour $t = t_i$. Au premier terme dans (1.17), nous retrouvons la solution adiabatique (1.14). Nous pouvons supposer que le deuxième terme s'annule en choisissant l'instant initial t_i tel que l'atome se trouve alors en dehors du champ lumineux (s'il s'agit d'un paquet d'ondes localisé), ou bien tel que le champ lumineux lui-même s'annule. En utilisant l'équation de SCHRÖDINGER (1.15) pour l'état fondamental, nous constatons que l'intégrand dans le troisième terme est de l'ordre de $[\hat{T} + V(\mathbf{r})]\,\bar{\psi}_g/\hbar$. En intégrant par parties, nous trouvons que le troisième terme dans (1.17) corrige la solution adiabatique par une quantité qui est plus petite par un facteur de l'ordre de $[\hat{T} + V(\mathbf{r})]/\hbar\Delta$. Dans le régime de couplage faible (1.12) et d'énergie cinétique faible devant le désaccord, cette correction est donc négligeable.

L'effet DOPPLER

Dans le calcul précédent, nous avons négligé l'opérateur d'énergie cinétique $\hat{T}$ devant le désaccord $\hbar\Delta$. Cette restriction n'est cependant pas nécessaire, et nous pouvons la remplacer par une condition moins forte.

Considérons à cet effet des atomes incidents avec une vitesse $\mathbf{v}_i$ et une énergie cinétique $E_i = \frac{1}{2}M\mathbf{v}_i^2$. Nous pouvons choisir E_i comme l'origine de l'énergie. C'est alors seulement le changement de l'énergie cinétique ΔE_{cin} qui est pertinente pour estimer l'ordre de grandeur de l'opérateur $\hat{T}$. Supposons qu'un atome dans l'état fondamental interagisse avec une onde plane lumineuse de vecteur d'onde $\mathbf{k}_L$. Lors d'un processus d'absorption, l'onde atomique reçoit un transfert de vecteur d'onde $\mathbf{k}_L$, et par conséquent, l'énergie cinétique change d'une quantité

$$\Delta E_{\text{cin}} = \hbar\Delta_D + \hbar^2\mathbf{k}_L^2/2M, \tag{1.18}$$

où Δ_D est donné par

$$\Delta_D = \mathbf{k}_L\cdot\mathbf{v}_i, \tag{1.19}$$

ce qui correspond au décalage DOPPLER de la fréquence lumineuse dans le référentiel de l'atome. Avec ce choix de l'origine de l'énergie, l'élimination adiabatique de l'état excité est donc justifiée si le décalage DOPPLER et la «fréquence de recul» $\hbar\mathbf{k}_L^2/2M$ sont faibles devant le désaccord

$$\frac{\hbar\mathbf{k}_L^2}{2M},\ |\Delta_D| \ll \Delta. \tag{1.20}$$

La condition la plus stricte portera généralement sur le décalage DOPPLER.

Le suivi adiabatique

Lorsqu'un atome est en mouvement dans un champ lumineux inhomogène, il faut que l'amplitude de probabilité $\bar{\psi}_e(\mathbf{r}, t)$ s'«adapte» au profil du champ $E(\mathbf{r})$, pour que la relation (1.17) soit toujours satisfaite. L'on peut s'attendre à ce que ceci soit le cas pour une vitesse atomique faible, et l'on parle alors d'un «suivi adiabatique» de l'atome sur la courbe de potentiel donnée par le déplacement lumineux de l'état fondamental. Notons que c'est seulement dans ce régime que nous pouvons considérer le potentiel dipolaire comme une énergie potentielle. Pour une vitesse trop grande, l'état atomique peut «décrocher», et l'atome passe alors sur une autre courbe de potentiel qui est associée à l'état excité. Nous donnons ici une estimation pour la probabilité de transition non adiabatique.

Introduisons à cet effet les «niveaux habillés»[5], c'est-à-dire les valeurs propres de la matrice de couplage (1.4). Pour un couplage faible, ils sont donnés par (voir la figure 1.2)

$$V_1(\mathbf{r}) = \frac{d^2}{\hbar\Delta}|E(\mathbf{r})|^2, \tag{1.21a}$$

$$V_2(\mathbf{r}) = -\hbar\Delta - \frac{d^2}{\hbar\Delta}|E(\mathbf{r})|^2. \tag{1.21b}$$

La valeur propre $V_1(\mathbf{r})$ est identique au potentiel dipolaire (1.16) pour l'état fondamental. Le niveau d'énergie $V_2(\mathbf{r})$ est proche de l'état excité. Nous notons qu'il attire l'atome vers les régions de haute intensité lumineuse (si le désaccord Δ est positif).

Les états habillés $|1, \mathbf{r}\rangle$, $|2, \mathbf{r}\rangle$ associés aux niveaux d'énergie $V_{1,2}(\mathbf{r})$ sont donnés par, au premier ordre en perturbations,

$$|1, \mathbf{r}\rangle = |g\rangle - \frac{dE(\mathbf{r})}{\hbar\Delta}|e\rangle \tag{1.22a}$$

$$|2, \mathbf{r}\rangle = |e\rangle + \frac{dE^*(\mathbf{r})}{\hbar\Delta}|g\rangle \tag{1.22b}$$

où nous retrouvons, aux amplitudes de l'état habillé $|1, \mathbf{r}\rangle$, la relation (1.14) qui permet d'éliminer l'état excité. Nous nous intéressons ici au «couplage non adiabatique » de

[5]Nous utilisons ici la notion de niveau habillé dans un sens large. A l'origine, elle a été introduite par C. COHEN-TANNOUDJI en tenant compte de la quantification du champ lumineux (voir par exemple [28]).

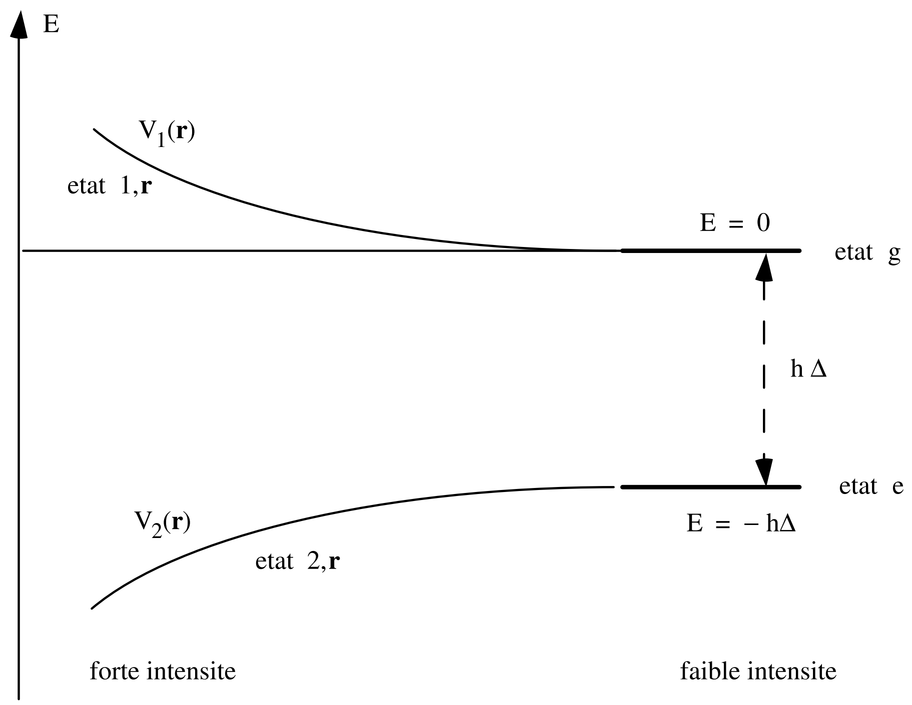

Figure 1.2: Niveaux habillés pour un atome à deux niveaux. L'intensité lumineuse augmente de la droite vers la gauche.

l'état $|1, \mathbf{r}\rangle$ vers l'état $|2, \mathbf{r}\rangle$ induit par le mouvement d'un atome à la vitesse $\mathbf{v}$. Ce couplage est caractérisé par la fréquence $\Omega_{\text{n.ad.}}$, avec

$$\Omega_{\text{n.ad.}} = \langle 2, \mathbf{r}|\mathbf{v}\cdot\nabla|1, \mathbf{r}\rangle = -(\mathbf{v}\cdot\nabla)\frac{dE(\mathbf{r})}{\hbar\Delta}. \tag{1.23}$$

La probabilité de transition non adiabatique $w_{\text{n.ad.}}$ est négligeable si la fréquence de couplage $\Omega_{\text{n.ad.}}$ est faible devant la séparation en fréquence des niveaux habillés.[6] Dans le régime du couplage faible, les niveaux sont approximativement séparés par le désaccord Δ, de sorte que l'estimation donnée par A. MESSIAH implique

$$w_{\text{n.ad.}} \leq \left(\frac{\max|\Omega_{\text{n.ad.}}|}{\min|V_1(\mathbf{r}) - V_2(\mathbf{r})|}\right)^2 \leq \left(\frac{k_L v}{\Delta}\frac{|dE(\mathbf{r})|}{\hbar\Delta}\right)^2. \tag{1.24}$$

Nous avons estimé le gradient du champ électrique $E(\mathbf{r})$ par $k_L E(\mathbf{r})$, où k_L est le vecteur d'onde optique.

Nous concluons de (1.24) que le suivi adiabatique est assuré, $w_{\text{n.ad.}} \ll 1$, dans la limite de faible saturation (1.12) et si la vitesse atomique v est au plus de l'ordre de Δ/k_L.

Remarque. Puisque le potentiel dipolaire (1.16) est indépendant du temps, l'énergie de l'atome est conservée lors de son interaction avec le champ lumineux. Ceci peut surprendre parce que c'est seulement l'énergie du système total, « atome + champ lumineux », qui est conservée *a priori.* Nous rappelons à ce sujet que la force dipolaire est le résultat de processus d'absorption et d'émission de lumière qui sont stimulés et qui font intervenir un champ lumineux avec une seule fréquence. Lorsque l'atome absorbe un photon d'un mode du champ et en émet un dans le même ou un autre mode spatial, l'état final de l'atome a donc la même énergie que l'état initial. Ces double processus sont schématisés sur la figure 1.3.

1.1.3 L'émission spontanée

A cause des fluctuations quantiques du champ électrique, l'état excité de l'atome est instable et possède une durée de vie $1/\Gamma$ finie. L'atome émet alors spontanément un photon, encaisse un recul et passe dans l'état fondamental. L'émission spontanée détruit la cohérence temporelle de l'atome parce que l'instant d'émission du photon spontané est aléatoire ; et comme l'atome recule dans une direction aléatoire, la cohérence spatiale de l'onde atomique est réduite à une longueur de cohérence de l'ordre de la longueur d'onde optique, après une seule émission spontanée [41, 87]. Nous nous intéressons ici au régime « cohérent » de l'optique atomique où la probabilité d'émission spontanée est faible. Nous montrons que ce régime peut être réalisé dans la limite de saturation faible, à condition de se limiter à un temps d'interaction pas trop long.

C'est parce que l'état habillé $|1, \mathbf{r}\rangle$ contient une contribution non nulle de l'état excité, qu'il acquiert une durée de vie finie $1/\Gamma_1$. Nous la calculons de deux manières :

[6] A. MESSIAH, *Mécanique Quantique*, nouvelle édition (1995), t. 2, chap. XVII, § 13.

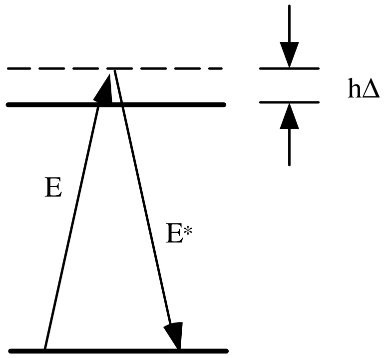

Figure 1.3: Interprétation du potentiel dipolaire en termes de processus d'absorption et d'émission stimulée.

- D'une part, nous pouvons décrire l'instabilité de l'état excité en ajoutant une partie imaginaire à son énergie : $E_e \mapsto E_e - \mathrm{i}\hbar\Gamma/2$, qui conduit à une décroissance exponentielle de l'amplitude $\psi_e(\mathbf{r}, t) \propto \mathrm{e}^{-\Gamma t/2}$. Le potentiel dipolaire pour l'état fondamental a alors lui aussi une partie imaginaire :

$$\Gamma_1 = -\frac{2}{\hbar}\,\mathrm{Im}\,V(\mathbf{r}) = \Gamma\frac{s}{2} \tag{1.25}$$

  où s est le paramètre de saturation

$$s = 2\frac{d^2|E(\mathbf{r})|^2}{\hbar^2(\Delta^2 + \Gamma^2/4)} \ll 1. \tag{1.26}$$

  Il est petit devant l'unité à cause de la limite de faible saturation (1.12).

- D'autre part, le nombre de photons spontanés par unité de temps (le « taux de fluorescence ») pour un atome dans l'état habillé $|1, \mathbf{r}\rangle$ est donné par la probabilité que l'atome se trouve dans l'état excité, multiplié par le taux de fluorescence Γ. Nous trouvons alors également

$$\Gamma_1 = \Gamma|\langle e|1, \mathbf{r}\rangle|^2 \simeq \Gamma\frac{s}{2}, \tag{1.27}$$

  dans la limite $\Delta \gg \Gamma$. Cette condition est en effet nécessaire pour décrire l'émission spontanée de cette manière, en se plaçant dans la base de l'atome habillé [28].

L'émission spontanée peut donc être négligée si le temps d'interaction τ_{int} est suffisamment court de façon à avoir

$$\Gamma_1\tau_{\mathrm{int}} = \frac{s}{2}\Gamma\tau_{\mathrm{int}} \ll 1. \tag{1.28}$$

1.1.4 L'«atome à un niveau»

En éliminant l'état excité d'un atome à deux niveaux, l'atome se réduit à une particule scalaire qui se déplace dans le potentiel dipolaire. Dans la réalité, les états atomiques ont cependant une structure de sous-niveaux magnétiques. La situation la plus proche d'un atome à un niveau est une transition $J = 0 \to J_e = 1$, où le potentiel dipolaire vaut

$$V(\mathbf{r}) = \frac{d^2|\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2}{\hbar\Delta} \tag{1.29}$$

et $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ est le vecteur (complexe) du champ électrique lumineux.

Ensuite, pour un atome préparé dans un sous-niveau magnétique particulier $|J, m\rangle$ et si le champ lumineux ne contient qu'une seule composante de polarisation $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_\mu E_\mu(\mathbf{r})$ ($\mu = 0, \pm 1$ caractérise le moment angulaire des photons du champ et $\mathbf{u}_\mu$ est son vecteur de polarisation), seulement deux sous-niveaux magnétiques interviennent dans le couplage, l'un dans la multiplicité de l'état fondamental et l'autre dans l'état excité. En absence d'émission spontanée, il s'agit donc d'une réalisation physique d'un système à deux niveaux. Le potentiel dipolaire pour l'état fondamental $|J, m\rangle$ contient alors un coefficient de CLEBSCH–GORDAN $c_{m\mu} = (J, m\,; 1, \mu | J_e, m + \mu)$

$$V_m(\mathbf{r}) = c_{m\mu}^2 \frac{d^2|E(\mathbf{r})|^2}{\hbar\Delta}. \tag{1.30}$$

Dans une situation plus générale, le potentiel dipolaire est un opérateur qui agit à l'intérieur de la multiplicité des sous-niveaux magnétiques. Ses éléments de matrice sont de la forme

$$\langle m_1|V(\mathbf{r})|m_2\rangle = \frac{d^2}{\hbar\Delta} \sum_{\mu,\mu',m_e} E_\mu^*(\mathbf{r})\, E_{\mu'}(\mathbf{r})\, (J, m_1\,; 1, \mu|J_e, m_e)(J_e, m_e|J, m_2\,; 1, \mu'). \tag{1.31}$$

Les valeurs propres du potentiel dipolaire donnent alors plusieurs courbes de potentiel. L'on rencontre des exemples dans le refroidissement radiatif à gradient de polarisation [29] et dans les réseaux optiques [88]. Comme les états propres varient généralement en fonction de la position, des transitions non adiabatiques entre les niveaux peuvent avoir lieu.

Conclusion. Le mouvement d'un atome dans un champ lumineux peut être décrit par le potentiel dipolaire de l'état fondamental dans les limites

$$\omega_A \gg \Delta \gg \left\{ \begin{array}{c} V_{\mathrm{AL}}/\hbar \\ k_L v \end{array} \right\}, \quad \Gamma s \tau_{\mathrm{int}} \ll 1, \tag{1.32}$$

où l'atome est éclairé par un champ lumineux quasi-résonnant, mais suffisamment désaccordé pour que le couplage induit par le champ et le décalage DOPPLER soient faibles ; et tant que le temps d'interaction est suffisamment court pour que l'on puisse négliger l'émission spontanée.

1.2 Rappels sur la quantification du mouvement dans la limite semi-classique

Nous résumons dans ce sous-chapitre la formulation de la mécanique classique à l'aide du principe de moindre action, ainsi que son lien avec la quantification du mouvement dans l'approche de l'intégrale de chemins de FEYNMAN.

1.2.1 Formalisme lagrangien

Le principe de moindre action

L'équation du mouvement pour un point matériel de masse M dans un potentiel $V(x,t)$ (qui peut dépendre du temps) s'écrit[7]

$$M\ddot{x}(t) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}V[x(t),t]. \tag{1.33}$$

Dans la formulation lagrangienne de la mécanique, l'on introduit le Lagrangien $L(x,\dot{x},t)$ qui est la différence entre l'énergie cinétique et l'énergie potentielle :

$$L(x,\dot{x},t) = \tfrac{1}{2}M\dot{x}^2 - V(x,t). \tag{1.34}$$

L'équation du mouvement (1.33) se déduit alors du

> **Principe de moindre action :** La trajectoire classique $x(t)$ qui relie les positions x_i et x_f aux instants t_i et t_f est celle qui, parmi toutes les trajectoires satisfaisant à ces conditions initiales et finales, minimise *l'action* $S[x(t)]$, avec
>
> $$S[x(t)] = \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t\, L[x(t),\dot{x}(t),t]. \tag{1.35}$$

Un calcul de variations permet de tirer la condition suivante du principe de moindre action

$$0 \stackrel{!}{=} \delta S \equiv \delta x(t)\left.\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right|_{t_i}^{t_f} + \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t\,\delta x(t)\left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) \tag{1.36}$$

après une intégration par parties. Le terme intégré s'annule parce que les positions initiales et finales sont fixées, $\delta x(t_{if}) \equiv 0$. Nous trouvons donc l'équation différentielle suivante pour la trajectoire classique :

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0, \tag{1.37}$$

qui s'appelle l'équation d'EULER–LAGRANGE. Pour un Lagrangien de la forme (1.34), l'on vérifie immédiatement que l'on retrouve l'équation de NEWTON (1.33).

[7]Pour alléger la notation, nous nous plaçons ici en une dimension. La généralisation à un nombre arbitraire de dimensions est cependant immédiate.

Lois de conservation

L'intérêt du formalisme Lagrangien est qu'il permet une grande liberté dans le choix des coordonnées. Les équations d'EULER–LAGRANGE ont en effet la même forme si l'on décrit le système par des «coordonnées généralisées» q_α. En particulier, s'il se trouve le Lagrangien ne dépend pas explicitement de la coordonnée q_α, la dérivée $\partial L/\partial q_\alpha$ s'annulle, et par conséquent, la quantité (l'«impulsion généralisée»)

$$p_\alpha \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \tag{1.38}$$

est conservée.

Exemple. Considérons une particule dans un plan sous l'influence d'un potentiel central $V(r)$. En introduisant des coordonnées polaires (r, ϕ), le Lagrangien devient

$$L(r, \dot{r}; \phi, \dot{\phi}) = \tfrac{1}{2} M \left(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2 \right) - V(r). \tag{1.39}$$

Il est indépendant de la coordonnée angulaire ϕ, de sorte que le moment angulaire azimuthal $M r^2 \dot{\phi}$ est une constante du mouvement.

Une autre loi de conservation apparaît lorsque le Lagrangien ne dépend pas explicitement du temps. Introduisons l'impulsion $p = \partial L/\partial \dot{x}$ et le *Hamiltonien*

$$H(p, x) = \dot{x} p - L(x, \dot{x}). \tag{1.40}$$

L'on constate alors que le Hamiltonien est constant le long d'une trajectoire classique $x(t)$:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} H = \ddot{x} p + \underbrace{\dot{x} \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} - \dot{x} \frac{\partial L}{\partial x}} - \ddot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0, \tag{1.41}$$

parce que les termes soulignés se simplifient à cause de l'équation d'EULER–LAGRANGE (1.37). Pour un Lagrangien de la forme (1.34), le Hamiltonien prend la forme familière

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2M} + V(x). \tag{1.42}$$

Si l'énergie est conservée, l'intégrale d'action (1.35) le long d'une trajectoire classique se simplifie : l'on peut séparer la partie de l'action qui dépend explicitement du temps,

$$\begin{aligned} S[x(t)] &= \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \, \{ \dot{x}(t)\, p(t) - H[p(t), x(t)] \} \\ &= \int_{x_i}^{x_f} p(x)\, \mathrm{d}x - E(t_f - t_i), \end{aligned} \tag{1.43}$$

où E est la valeur constante de l'énergie et l'impulsion $p(x)$ est exprimée en fonction de la position x, en utilisant la conservation de l'énergie : $p(x) = [2M(E - V(x))]^{1/2}$.

Le principe de MAUPERTUIS

Le premier terme de l'action (1.43) s'appelle l'«action réduite». Celle-ci permet de formuler un autre principe variationnel, celui de MAUPERTUIS, qui s'applique lorsque l'énergie est conservée.

> **Principe de** MAUPERTUIS **:** La trajectoire classique[8] $x(l)$ qui relie les positions x_i et x_f est celle qui, parmi toutes les trajectoires qui satisfont à ces conditions initiales et finales, pour une énergie E fixée, minimise l'action réduite $S'[x(l)]$, avec
>
> $$S'[x(l)] = \int_{x_i}^{x_f} p[x(l)]\,\mathrm{d}l. \tag{1.44}$$

Ce principe variationnel correspond au principe de FERMAT de l'optique : l'impulsion $p(x)$ correspond alors à l'indice $n(x)$, et l'action réduite au chemin optique $\int n[x(l)]\,\mathrm{d}l$.

Dans le cas particulier d'une particule libre, le module de l'impulsion est constant ; l'action réduite (1.44) est alors minimale pour une trajectoire qui relie les positions x_i et x_f par une droite. En optique, l'on montre ainsi que les rayons lumineux sont des droites dans un milieu à indice constant.

Action pour une vitesse initiale donnée

Finalement, introduisons une autre variante de l'action $S[x(t)]$ (1.35) qui correspond à des conditions initiales et finales différentes. L'on rencontre ces conditions dans une situation de diffusion où les particules sont incidentes dans un jet de vitesse donnée. Nous fixons donc à l'instant initial t_i l'impulsion p_i et à l'instant final t_f la position finale x_f. La trajectoire classique qui satisfait à ces conditions est alors celle qui minimise l'action suivante :

$$S_2[x(t)] = p_i\, x(t_i) + \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t\, L[x(t), \dot{x}(t), t], \tag{1.45}$$

où le premier terme sert à fixer l'impulsion initiale : un calcul variationnel analogue à (1.36) donne en effet la condition

$$0 \overset{!}{=} \delta S = p_i\, \delta x(t_i) + \delta x(t)\, p(t)\Big|_{t_i}^{t_f} + \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t\, \delta x(t) \left(\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right). \tag{1.46}$$

L'annulation de l'intégrale est équivalente à l'équation d'EULER–LAGRANGE. Le terme intégré s'annule pour t_f parce que la position finale est fixée. A l'instant initial t_i, nous avons donc $[p_i - p(t_i)]\,\delta x(t_i) = 0$, ce qui détermine l'impulsion initiale $p(t_i) = p_i$.

[8] Le paramètre l donne la longueur de la trajectoire.

1.2.2 Quantification du mouvement avec l'intégrale de FEYNMAN

Le point de vue habituel

Dans la formulation habituelle de la mécanique quantique, l'on introduit la fonction d'onde $\psi(x,t)$ de la particule, qui donne l'*amplitude de probabilité* pour que la particule se trouve à l'instant t à la position x. La fonction d'onde satisfait à une équation d'ondes, l'équation de SCHRÖDINGER

$$\mathrm{i}\hbar\,\partial_t \psi(x,t) = \hat{H}(x, -\mathrm{i}\hbar\partial_x)\,\psi(x,t), \tag{1.47}$$

dans laquelle on obtient l'opérateur Hamiltonien $\hat{H}$ en remplaçant l'impulsion p par l'opérateur différentiel $-\mathrm{i}\hbar\partial_x$.

L'intégrale de chemins

R. P. FEYNMAN a donné une formulation alternative de la mécanique quantique à l'aide de l'intégrale de chemins : l'on considère l'amplitude de probabilité de trouver une particule à l'instant t_f à la position x_f, étant donnée que la particule était à l'instant t_i à la position x_i bien définie. Cette amplitude, que nous notons $G(x_f, t_f|x_i, t_i)$, est une solution à l'équation de SCHRÖDINGER avec la condition que la particule est initialement localisée à une position donnée. L'on appelle $G(x_f, t_f|x_i, t_i)$ également le *propagateur*. R. FEYNMAN l'écrit sous la forme [69, 71, 72]

$$G(x_f, t_f|x_i, t_i) = \int_i^f \mathcal{D}[x(t)]\, \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x(t)]\right), \tag{1.48}$$

où $S[x(t)]$ est l'action classique introduite à l'équation (1.35), et le symbôle $\mathcal{D}[x(t)]$ signifie une intégration sur «*toutes les trajectoires classiques qui satisfont aux conditions initiales et finales* $x(t_i) = x_i$, $x(t_f) = x_f$». Il n'est pas du tout aisé de donner une formulation mathématique précise pour cette intégrale[9], mais nous n'allons pas entrer dans les détails.[10]

La limite semi-classique du propagateur

Le point de vue de FEYNMAN rend particulièrement transparente la limite semi-classique, où l'action $S[x(t)]$ varie rapidement à l'échelle de la constante de PLANCK $\hbar$. Pour la plupart des trajectoires, les facteurs de phase $\exp(\mathrm{i}S[x(t)]/\hbar)$ interfèrent alors de façon déstructive, et il ne reste plus que les contributions des trajectoires

[9]Dans la pratique, l'on découpe l'intervalle $[t_i, t_f]$ en N morceaux de même longueur et considère des trajectoires qui sont rectilignes sur chaque morceau. La différentielle de l'intégrale dans (1.48) devient alors $\mathrm{d}x_1 \dots \mathrm{d}x_N$, et l'on peut l'évaluer. C'est à la fin du calcul que l'on prend la limite $N \to \infty$.

[10]Dans un sens, R. FEYNMAN a rétabli dans le monde quantique l'«égalité entre les trajectoires» : elles contribuent toutes de la même façon au propagateur $G(x_f, t_f|x_i, t_i)$; dans le monde classique, par contre, règne le «favoritisme» privilégiant l'unique trajectoire qui minimise l'action.

qui rendent *stationnaire la phase* $S[x(t)]/\hbar$. Par le principe de moindre action, ce sont donc les trajectoires classiques $x_{\rm cl}(t)$ qui dominent l'amplitude de probabilité dans la limite semi-classique. Il est alors possible de calculer la *phase* du propagateur $G(x_f, t_f|x_i, t_i)$ par le moyen de l'intégrale d'action

$$G(x_f, t_f|x_i, t_i) \propto \exp \mathrm{i}\varphi_{\rm cl} = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x_{\rm cl}(t)]\right), \tag{1.49}$$

où $x_{\rm cl}(t)$ est la trajectoire classique qui relie les positions x_i et x_f. Du point de vue quantique, la valeur de l'action pour la trajectoire classique détermine donc une quantité importante, la phase de la fonction d'onde. Rappelons que dans le contexte de la mécanique classique, la valeur numérique de l'action n'avait pas d'importance, elle servait seulement à formuler les principes variationnels.

Plusieurs améliorations de l'expression (1.49) pour le propagateur semi-classique ont été étudiées. Notons d'abord que (1.49) fut déjà donné par J. H. VAN VLECK en 1928 [70], bien avant que FEYNMAN ne formulât son intégrale. Ensuite, il est possible que plusieurs trajectoires classiques existent qui rendent la phase stationnaire ; leurs facteurs de phase $\exp \mathrm{i}\varphi_{\rm cl}$ interfèrent alors dans l'amplitude de probabilité finale. Finalement, la phase du propagateur doit être corrigée par des multiples de $\pi/2$ lorsque l'ensemble des trajectoires classiques contient des « caustiques », c'est-à-dire des points de convergence ou des lignes et surfaces d'accumulation [89, 70]. Dans le cas d'une seule dimension spatiale, ceci revient à la formule de raccordement de l'approximation BKW autour d'un point de rebroussement classique.[11]

Exemple. Calculons l'action pour une particule dans le champ de pesanteur. Le potentiel dans le Lagrangien vaut alors $V(x) = Mgx$. En utilisant la solution générale pour la trajectoire classique

$$x_{\rm cl}(t) = x_i + v_0(t - t_i) - \tfrac{1}{2}g(t - t_i)^2, \tag{1.50}$$

où x_i et v_0 sont la position et la vitesse initiale, l'intégrale d'action (1.35) donne le résultat suivant, après avoir effectué deux intégrations

$$\begin{aligned} S[x_{\rm cl}(t)] &= +\frac{M}{6g}\left[(v_0 - g(t_f - t_i))^3 - v_0^3\right] \\ &\quad -Mg\left[x_i(t_f - t_i) + \tfrac{1}{2}v_0(t_f - t_i)^2 - \tfrac{1}{6}g(t_f - t_i)^3\right]. \end{aligned} \tag{1.51}$$

Dans cette expression, la vitesse initiale v_0 est fixée par les positions initiale et finale :

$$v_0 = \frac{x_f - x_i}{t_f - t_i} - \frac{g(t_f - t_i)}{2}. \tag{1.52}$$

[11] A. MESSIAH, *Mécanique Quantique*, nouvelle édition (1995), t. I, chap. VI, § 9.

Nous pouvons aussi faire un calcul alternatif et utiliser la conservation de l'énergie. L'action se simplifie alors comme à l'équation (1.43), et il ne reste plus qu'une seule intégrale à calculer.[12] Nous trouvons alors

$$\begin{aligned} S[x_{\rm cl}(t)] &= +\frac{M}{3g}\left[(v_0 - g(t_f - t_i))^3 - v_0^3\right] \\ &\quad - \left[\tfrac{1}{2}Mv_0^2 + Mgx_i\right](t_f - t_i). \end{aligned} \tag{1.53}$$

Les deux méthodes donnent évidemment le même résultat final pour l'action. Nous concluons que l'on a le choix entre plusieurs formulations équivalentes de l'action, qui dans la pratique conduisent à des calculs plus ou moins complexes.

Le cas d'une onde plane incidente

Considérons le cas d'une particule qui, à l'instant t_i, est décrite par une onde plane avec un vecteur d'onde k_i bien défini. Par le principe de superposition, sa fonction d'onde à la position x_f à l'instant t_f est donnée par

$$\psi(x_f, t_f) = G(x_f, t_f|k_i, t_i) \equiv \int \mathrm{d}x_i\, G(x_f, t_f|x_i, t_i) \exp \mathrm{i}k_i x_i. \tag{1.54}$$

En cherchant de nouveau la condition de phase stationnaire pour cette intégrale, nous trouvons

$$\frac{1}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x_i} + k_i = 0. \tag{1.55}$$

Or, la dérivée de l'action par rapport à la coordonnée initiale est reliée à l'impulsion initiale [voir (1.43)], de sorte que la phase est stationnaire pour la trajectoire classique dont l'impulsion initiale vaut $p(t_i) = \hbar k_i$. La phase de l'amplitude de probabilité finale vaut donc

$$\varphi_{\rm cl} = k_i x_{\rm cl}(t_i) + \frac{1}{\hbar} S[x_{\rm cl}(t)], \tag{1.56}$$

où le premier terme correspond à la phase de l'onde plane incidente à la position initiale de la trajectoire classique. La phase (1.56) est identique à l'action $S_2/\hbar$ que nous avons introduite pour une impulsion initiale donnée [l'équation (1.45)].

Exemple. Calculons le déphasage pour la réflexion par un potentiel «semi-harmonique», c'est-à-dire une barrière de potentiel parabolique (voir la figure 1.4)

$$V(x) = \tfrac{1}{2}M\omega^2 x^2, \quad x < 0. \tag{1.57}$$

Pour définir le déphasage $\Delta\varphi$ à la réflexion, nous considérons une onde incidente dans la région asymptotique $x \to +\infty$ avec le vecteur d'onde $-k_i$ et l'énergie E_i. Après

[12] Cette intégrale, $\int p(x)\,\mathrm{d}x$, se calcule même sans qu'il soit nécessaire de connaître la trajectoire classique en fonction du temps.

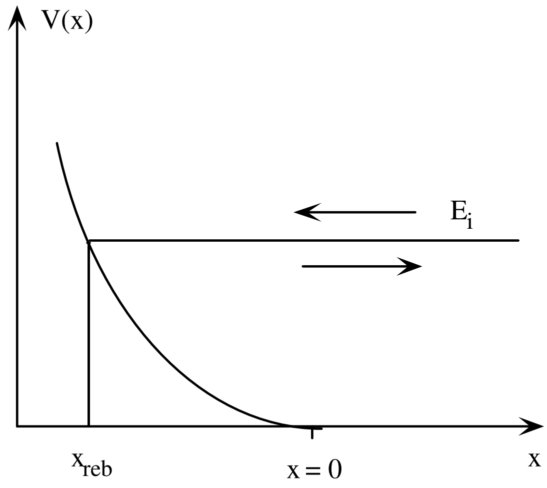

Figure 1.4: Réflexion d'une particule par un potentiel semi-harmonique.

réflexion par la barrière, elle se trouve de nouveau dans la région asymptotique, et son vecteur d'onde a changé de signe. Nous définissons le déphasage à la réflexion par le comportement asymptotique suivant pour la fonction d'onde totale

$$x \to +\infty : \quad \psi(x,t) \propto \left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_i x} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_i x + \Delta\varphi)} \right] \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_i t/\hbar}. \tag{1.58}$$

Le déphasage $\Delta\varphi$ donne la correction de phase par rapport à une réflexion instantanée à la position $x = 0$. Dans la limite semi-classique, nous trouvons donc le déphasage $\Delta\varphi$ en écrivant la phase $\varphi_{\rm cl}$ de l'onde réfléchie de la façon suivante

$$x_f \to +\infty : \quad \varphi_{\rm cl} = M v_i x_f/\hbar + \Delta\varphi - \pi - E_i(t_f - t_i)/\hbar, \tag{1.59}$$

où $v_i = \hbar k_i/M$ est la vitesse incidente et le déphasage π correspond à la réflexion par une barrière infinie à $x = 0$ [voir (1.58)]. Nous nous servons de la conservation de l'énergie pour calculer l'action. En comparant (1.45) et (1.59), nous constatons qu'il ne reste plus que l'action réduite (1.44) à calculer. Intégrons-la par parties pour trouver

$$(-M v_i) x_i + \int \mathrm{d}x \, p(x) = M v_i x_f + \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \, x_{\rm cl}(t) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} V[x_{\rm cl}(t)], \tag{1.60}$$

parce que l'impulsion de la particule réfléchie tend vers $p(t_f) = M v_i$ dans la région asymptotique. Nous voyons donc apparaître la phase de l'onde réfléchie, $M v_i x_f$, de sorte que le déphasage est simplement donné par l'intégrale suivante où intervient la force agissant sur la particule :

$$\Delta\varphi = \pi + \frac{1}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \, x_{\rm cl}(t) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} V[x_{\rm cl}(t)]. \tag{1.61}$$

Dans le demi-potentiel harmonique, la trajectoire $x_{\rm cl}(t)$ est donnée par

$$t_0 < t < t_0 + \pi/\omega : \quad x_{\rm cl}(t) = -\frac{v_i}{\omega} \sin \omega(t - t_0), \tag{1.62}$$

où t_0 est l'instant où l'atome entre dans la barrière de potentiel $x < 0$. Par conséquent, l'intégrale (1.61) pour le déphasage devient

$$\Delta\varphi = \pi + \frac{M\omega^2}{\hbar} \int_{t_0}^{t_0+\pi/\omega} {\rm d}t\, x_{\rm cl}^2(t) = \pi + \frac{\pi M v_i^2}{2\hbar\omega}. \tag{1.63}$$

Pour interpréter l'ordre de grandeur du déphasage, nous notons que la particule rebrousse chemin dans la barrière de potentiel à la position $x_{\rm reb} = -v_i/\omega$. Le déphasage (1.63) est donc de l'ordre de la phase $M v_i x_{\rm reb}/\hbar$ qui correspond au mouvement libre jusqu'au point de rebroussement à la vitesse incidente.

Préfacteur de l'amplitude de probabilité semi-classique

Pour finir, donnons la normalisation de l'amplitude de probabilité $G(x_f, t_f|k_i, t_i)$ dans la limite semi-classique. Nous nous servons à cet effet d'un argument complètement classique : dans la limite semi-classique la quantité $|G(x_f, t_f|k_i, t_i)|^2$ donne en effet la probabilité pour que la particule arrive à la position finale x_f. Or, le nombre de particules qui arrivent à x_f, à ${\rm d}x_f$ près, est égal au nombre de particules qui sont parties de la position $x_i = x_{\rm cl}(t_i)$, à ${\rm d}x_i$ près. Comme la densité spatiale dans l'onde plane incidente est uniforme, la normalisation de l'amplitude semi-classique est donc la suivante[13]

$$G(x_f, t_f|k_i, t_i) \propto \left| \frac{\partial x_i}{\partial x_f} \right|^{1/2} \exp {\rm i}\varphi_{\rm cl}. \tag{1.64}$$

Notons que l'on obtient un résultat similaire dans l'optique géométrique[14] : le flux d'énergie lumineuse $\propto n|\mathcal{E}|^2 {\rm d}\Sigma$ d'un «pinceau» de rayons géométriques avec une section ${\rm d}\Sigma$ est conservé le long des rayons, de sorte que l'amplitude $\mathcal{E}$ du champ lumineux varie comme $(n\,{\rm d}\Sigma)^{-1/2}$.

Exemple. La barrière semi-harmonique permet de calculer explicitement le préfacteur dans (1.64) : considérons à cet effet une particule qui part à l'instant t_i de la région asymptotique $x_i \to +\infty$ et se trouve à l'instant t_f dans la barrière de potentiel $x_f < 0$. Les positions x_i et x_f vérifient alors les équations

$$x_i = -v_i(t_i - t_0), \tag{1.65a}$$
$$x_f = -\frac{v_i}{\omega} \sin \omega(t_f - t_0) \quad (t_f - t_0 < \pi/\omega). \tag{1.65b}$$

[13] En un nombre plus élevé de dimensions, le rapport $\partial x_i/\partial x_f$ dans (1.64) devient le «déterminant de VAN VLECK» $\det \partial \mathbf{r}_i/\partial \mathbf{r}_f = -\det \partial^2 S/\partial \mathbf{r}_f \partial \mathbf{p}_i$ [70].

[14] M. BORN et E. WOLF, *Principles of Optics*, 6e édition, chap. 3.1.2.

La deuxième équation (1.65b) permet d'exprimer l'instant t_0 en fonction de x_f, t_f et v_i. En reportant la solution dans l'expression pour la position initiale x_i, nous pouvons calculer sa dérivée par rapport à x_f, ce qui donne

$$\frac{\partial x_i}{\partial x_f} = \frac{-1}{\sqrt{1-(\omega x_f/v_i)^2}} = \frac{-1}{\sqrt{1-(x_f/x_{\mathrm{reb}})^2}} \tag{1.66}$$

Nous retrouvons ici le résultat bien connu que l'expression semi-classique pour la fonction d'onde diverge au point de rebroussement x_{reb}, comme c'est le cas pour l'approximation BKW, par exemple. En effet, nous pouvons encore écrire le préfacteur (1.66) comme

$$\frac{\partial x_i}{\partial x_f} = \frac{v_i}{v(x_f)}, \tag{1.67}$$

ce qui donne avec (1.64) la normalisation familière de la fonction d'onde de l'approximation BKW.

Remarque. Le résultat (1.67) est valable pour un potentiel quelconque. Pour le démontrer, il suffit de choisir l'instant t_0 au voisinage de t_i. La position finale x_f est donnée par la trajectoire classique $x_{\mathrm{cl}}(t_f)$ et dépend en fait seulement de la différence $t_f - t_0$ parce que l'origine du temps est arbitraire. La dérivée $\partial t_0/\partial x_f$ est alors identique à l'inverse de la vitesse $v(x_f)$, et (1.67) s'ensuit.

Conclusion

Dans le point de vue de l'intégrale de chemins de FEYNMAN, l'on peut calculer, dans la limite semi-classique, le propagateur quantique par la méthode de la phase stationnaire. En vertu du principe de moindre action, ce sont alors seulement les trajectoires classiques qui contribuent à l'intégrale. Le long des trajectoires classiques, l'action permet de calculer la phase de la fonction d'onde.

Première partie

Réflexion spéculaire d'atomes par le miroir à onde évanescente

Introduction à la première partie

Nous étudions dans cette partie, constituée des chapitres 2 à 4, la réflexion spéculaire d'atomes par la barrière de potentiel du miroir à onde évanescente. Rappelons que les principes physiques de ce miroir ont été exposés en 1982 par R. J. COOK et R. K. HILL («*An electromagnetic mirror for neutral atoms*» [1]), et que la réflexion d'atomes par une onde évanescente a été observée expérimentalement en 1987 par le groupe de V. S. LETOKHOV de l'Institut de Spectroscopie de l'Académie de Sciences de l'U. R. S. S [15]. L'on utilisa alors un jet de sodium en incidence rasante. En 1990, le groupe de S. CHU de l'Université de Stanford (Etats-Unis) fut le premier à observer la réflexion d'atomes en incidence normale, où les atomes tombent d'un piège magnéto-optique à quelques centimètres au-dessus du miroir, sous l'influence du champ de pesanteur [22].

Nous allons supposer que l'onde évanescente est créée par la réflexion totale interne d'une onde plane lumineuse sur une interface diélectrique–vide. Son potentiel dipolaire est alors invariant par translation dans les directions parallèles à l'interface, et le problème se réduit à une barrière de potentiel en une dimension le long de la direction normale. La réflexion spéculaire représente donc une situation assez pure pour analyser le mouvement de l'atome des deux points de vue classique et quantique.

Du point de vue classique, l'atome est réfléchi si son énergie cinétique incidente le long de la normale est inférieure à la valeur maximale de l'énergie potentielle : en entrant dans le potentiel, l'atome est ralenti et il s'approche de la surface du diélectrique jusqu'au point de rebroussement, où l'énergie potentielle est égale à l'énergie cinétique incidente. L'atome revient alors en arrière et finit par sortir de l'onde évanescente à la vitesse à laquelle il y est entré, à ceci près que la composante normale de sa vitesse a changé de signe. La trajectoire classique de l'atome dans le potentiel dipolaire de l'onde évanescente a été publiée par le groupe de G. I. OPAT en 1992 [11]. Il a également donné une analyse semi-classique de la phase de l'onde atomique réfléchie par le miroir, sur laquelle nous reviendrons dans un instant.

Du point de vue quantique, la fonction d'onde de l'atome, solution de l'équation de SCHRÖDINGER stationnaire, est une superposition d'une onde incidente et d'une onde réfléchie dans la région asymptotique où le potentiel du miroir s'annule. A l'intérieur du potentiel, l'onde atomique est composée d'une «onde évanescente atomique» qui pénètre, par «effet tunnel», dans la région classiquement interdite au-delà du point de

[1] *Optics Communications* **43**, pp. 258–260 (octobre 1982).

rebroussement classique ; et d'une onde stationnaire en-déçà du point de rebroussement, qui présente des oscillations avec une période de l'ordre de la longueur d'onde de BROGLIE incidente

$$\lambda_{\mathrm{dB}} = \frac{2\pi\hbar}{Mv_{zi}}.$$

La longueur d'onde de DE BROGLIE introduit une deuxième échelle de longueur dans le problème de la réflexion d'atomes que nous pouvons comparer à l'extension caractéristique de la barrière de potentiel. Nous distinguons alors entre deux limites :

- la limite « semi-classique » où la longueur d'onde atomique est beaucoup plus petite que l'extension du potentiel. Dans ce régime — qui correspond généralement à la situation expérimentale pour le miroir à atomes —, la barrière de potentiel varie lentement à l'échelle de λ_{dB} ;

- la limite « quantique » d'une longueur d'onde atomique grande devant l'extension du potentiel.

Dans son analyse [11], le groupe de G. I. OPAT, se restreignant à la limite semi-classique, s'est servi de l'approximation de BRILLOUIN, KRAMERS et WENTZEL (l'approximation « BKW »[2]) pour calculer la phase de l'onde atomique réfléchie. Cependant, cette méthode ne peut donner la fonction d'onde dans une région autour du point de rebroussement : à cette position, la solution BKW diverge parce que la vitesse classique s'annule.

Dans la limite quantique, l'on peut s'attendre à ce que la forme détaillée de la barrière de potentiel importe peu parce qu'elle est moyennée sur la longueur d'onde, beaucoup plus grande, de DE BROGLIE. Ceci suggère une description « effective » de la barrière en termes d'un miroir parfaitement réfléchissant, c'est-à-dire d'une barrière de potentiel infinie. Le seul paramètre libre est alors la position de ce *miroir effectif* que l'on peut calculer à partir de la relation de phase entre l'onde incidente et l'onde réfléchie. La position du miroir effectif détermine si le miroir à atomes est *dispersif* : tel est le cas si le miroir effectif varie avec la longueur d'onde incidente ou, formulation équivalente, avec la vitesse incidente de l'atome. En optique lumineuse, un exemple de miroir non-dispersif est le miroir métallique : le champ lumineux doit s'annuler sur la surface du miroir et y présente un nœud, ce qui fixe la phase de l'onde réfléchie. Un miroir à couches diélectriques, par contre, est dispersif parce qu'il fait intervenir des réflexions multiples aux interfaces qui dépendent des déphasages du champ lumineux dans les couches et donc de la longueur d'onde lumineuse.

[2] A. MESSIAH, *Mécanique Quantique* (Dunod, Paris, nouvelle édition 1995), t. 1, chap. VI. En anglais, le signet « WKB » est utilisé, et parfois aussi « JWKB » en mémoire de JONES, voir N. FRÖMAN et P. O. FRÖMAN, *JWKB approximations : contributions to the theory* (North-Holland, Amsterdam, 1965).

L'organisation de la partie I

Chap. 2. Nous introduisons la **barrière de potentiel du miroir** à atomes qui est la somme du potentiel dipolaire de l'onde évanescente et du potentiel de l'interaction de VAN DER WAALS.

Chap. 3. Nous nous limitons dans la suite au seul potentiel dipolaire qui présente une forme de simple exponentielle et pour lequel on peut donner des **solutions analytiques explicites** à l'équation de SCHRÖDINGER. A l'aide de ces solutions, nous calculons le déphasage que subit l'onde atomique lors de la réflexion. Le passage continu du régime semi-classique vers le régime quantique est étudié. Nous notons également la solution explicite pour la trajectoire classique, qui permet de définir un miroir effectif classique.

En annexe au chapitre 3, nous reproduisons l'article «*Phase shifts of atomic de Broglie waves at an evanescent wave mirror*» par C. H., J.-Y. COURTOIS, R. KAISER, C. WESTBROOK et A. ASPECT, qui a été publié dans le numéro spécial *Laser cooling and trapping* de la revue *Laser Physics* **4** (no. 5), pp. 1042–1049 (1994).

Chap. 4. A titre d'illustration du régime quantique, nous étudions la **réflexion** d'atomes **par un potentiel attractif**, qui correspond à une onde évanescente avec une fréquence en-dessous de la résonance atomique (un désaccord «rouge»). Alors que du point de vue classique, aucune réflexion ne peut avoir lieu, l'atome est en fait réfléchi avec une probabilité non nulle lorsque la longueur d'onde incidente est beaucoup plus grande que la profondeur de pénétration de l'onde évanescente.

En annexe au chapitre 4, nous reproduisons l'article «*Quantum reflection : atomic matter-wave optics in an attractive exponential potential*» par C. H., C. I. WESTBROOK, A. ASPECT, publié dans le *Journal of the Optical Society of America B* **13**, pp. 233–243 (février 1996).

Remarque : Note pour la lecture. Le chapitre central de cette première partie est le chapitre 3 parce que les fonctions d'onde dans le potentiel dipolaire de l'onde évanescente simple vont être utilisées tout au long de la suite de ce mémoire. Le chapitre 2 précise les conditions dans lesquelles il est justifiée de négliger l'interaction de VAN DER WAALS par rapport au potentiel dipolaire de l'onde évanescente.

Chapitre 2

La barrière de potentiel du miroir à atomes

La barrière de potentiel du miroir à atomes est réalisée par le potentiel dipolaire d'une onde évanescente. Dans le régime de faible saturation et en négligeant l'émission spontanée, la réflexion d'atomes devient un problème hamiltonien. En outre, le potentiel dipolaire est invariant par translation dans les directions parallèles à l'interface où l'onde évanescente est créée. L'atome est donc en mouvement rectiligne et uniforme parallèle à l'interface, et nous pouvons nous limiter au mouvement dans la direction normale.

Nous présentons dans ce chapitre le champ lumineux et le potentiel dipolaire de l'onde évanescente, et nous précisons les conditions dans lesquelles il est légitime de négliger l'interaction de VAN DER WAALS par rapport à ce potentiel.

2.1 L'onde évanescente

Considérons une onde lumineuse plane qui subit une réflexion totale interne sur une interface entre le vide et un milieu diélectrique (la figure 2.1). Dans le vide au-dessus de l'interface $z = 0$, une onde évanescente se propage parallèlement à la surface avec une amplitude qui décroît de façon exponentielle en fonction de la distance z. L'amplitude complexe du champ électrique de l'onde évanescente est donnée par, dans l'approximation scalaire,

$$z > 0 : \quad E(\mathbf{r}) = E_0 \exp\left(\mathrm{i}qx - \kappa z\right). \tag{2.1}$$

Les composantes du vecteur d'onde lumineux dans le plan d'incidence xOz sont notées par q et $\mathrm{i}\kappa$. L'amplitude E_0 est reliée à l'amplitude du champ incident dans le diélectrique par un coefficient de FRESNEL.

La composante q du vecteur d'onde de l'onde évanescente est donnée par

$$q = k_L\, n_d \sin\theta_L. \tag{2.2}$$

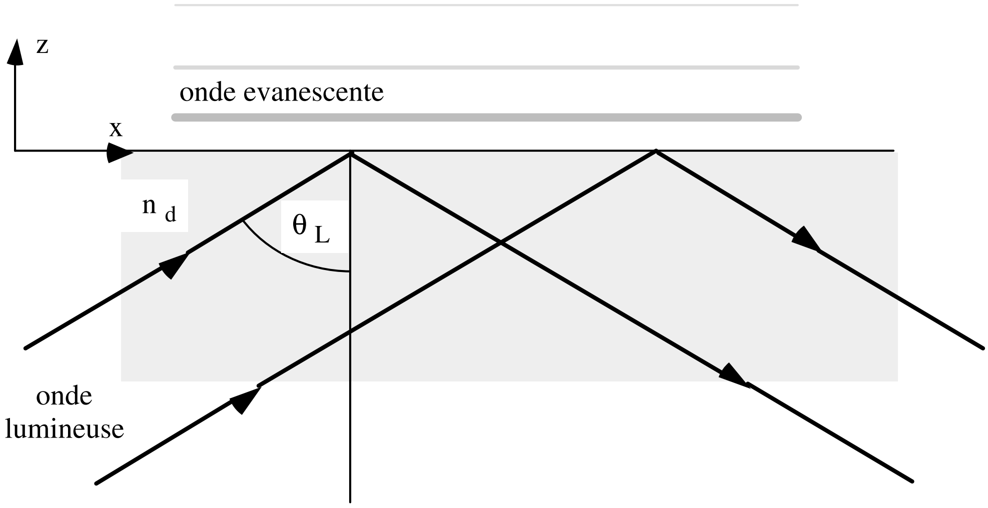

Figure 2.1: Dispositif expérimental schématique pour le miroir à onde évanescente.

Dans cette expression, $k_L \equiv \omega_L/c$ est le module du vecteur d'onde optique dans le vide, n_d est l'indice de réfraction du diélectrique et θ_L est l'angle d'incidence de l'onde lumineuse, mesuré par rapport à l'axe vertical (voir la figure 2.1). Dans la direction verticale, l'onde évanescente (2.1) a une «épaisseur» donnée par la longueur de décroissance $1/\kappa$, avec

$$\kappa = k_L\sqrt{n_d^2 \sin^2\theta_L - 1}. \tag{2.3}$$

L'épaisseur de l'onde évanescente est généralement de l'ordre de la longueur d'onde optique réduite $\lambda_L/2\pi$. Par contre, pour une onde incidente au voisinage de l'angle limite ($n_d \sin\theta_L \rightarrow 1$), κ tend vers zéro et la profondeur de pénétration de l'onde évanescente devient grande. La valeur minimale de l'épaisseur est $\lambda_L/2\pi(n_d^2 - 1)^{1/2}$; elle correspond à une onde lumineuse qui est incidente dans le diélectrique en incidence rasante.

2.2 Le potentiel dipolaire

Une onde évanescente avec un désaccord à résonance Δ positif correspond à un potentiel dipolaire (1.16) répulsif avec une forme exponentielle

$$V(z) = V_{\max}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}, \tag{2.4}$$

dont la valeur maximale à l'interface ($z = 0$) est égale à

$$V_{\max} = \frac{d^2|E_0|^2}{\hbar\Delta}. \tag{2.5}$$

Comme le potentiel dipolaire $V(z)$ ne dépend que de la distance z, l'atome est en mouvement rectiligne et uniforme dans dans le plan xOy. Nous pouvons alors nous limiter à la direction Oz pour décrire son mouvement.

2.2.1 La condition de réflexion

Si nous considérons seulement le potentiel dipolaire de l'onde évanescente, la hauteur de la barrière de potentiel du miroir est donnée par $V_{\rm max}$, en supposant que les atomes qui atteignent la surface du diélectrique sont alors perdus. La condition de réflexion pour le miroir s'écrit donc

$$E_{zi} \equiv \tfrac{1}{2} M v_{zi}^2 \le V_{\rm max}, \tag{2.6}$$

où $-v_{zi}$ est la composante de vitesse incidente le long de la normale au miroir, et E_{zi} l'énergie cinétique associée.

Si la condition de réflexion (2.6) est satisfaite, l'atome s'approche de l'interface jusqu'à une distance $z_{\rm reb}$, avec

$$z_{\rm reb} = \frac{1}{2\kappa} \log \frac{V_{\rm max}}{E_{zi}}. \tag{2.7}$$

A cette position se trouve le *point de rebroussement* de l'atome : sa vitesse s'annule, et sa trajectoire classique est renversée. L'atome redescend ensuite la barrière de potentiel en reprenant son énergie cinétique initiale, pour sortir de l'onde évanescente à la vitesse v_{zi}. Nous pouvons nous attendre à ce que la réflexion a lieu sur une échelle de temps de l'ordre de

$$\tau_{\rm int} = \frac{1}{\kappa v_{zi}}, \tag{2.8}$$

ce qui sera confirmé au chapitre 3, où nous donnerons la trajectoire classique dans le potentiel dipolaire (2.4) [à l'équation (**Pha** 2)]. Le temps caractéristique $\tau_{\rm int}$ est généralement de l'ordre de la centaine de nanosecondes.

2.2.2 Conditions de validité

Nous rassemblons ici les contraintes qu'impose l'approximation d'atome à un niveau où l'interaction avec l'onde évanescente est décrite par le potentiel dipolaire.

La condition de réflexion ainsi que le **régime de faible saturation** donnent les inégalités suivantes pour le paramètre de saturation $s(0)$ à la surface du diélectrique [voir (1.26)]

$$2\frac{E_{zi}}{\hbar\Delta} \overset{(*)}{<} 2\frac{V_{\rm max}}{\hbar\Delta} \approx s(0) \ll 1. \tag{2.9}$$

La condition de réflexion $(*)$ impose une borne inférieure pour l'intensité I_L du champ lumineux[1], étant donné que le paramètre de saturation $s(0)$ vaut

$$s(0) = \frac{2\, d^2 |E_0|^2/\hbar^2}{\Delta^2 + \Gamma^2/4} = \frac{I_L/I_{\rm sat}}{1 + 4\Delta^2/\Gamma^2}, \tag{2.10}$$

avec $I_{\rm sat}$ l'intensité de saturation.

[1]Nous définissons l'«intensité» de l'onde évanescente comme étant proportionnelle au carré du champ électrique.

Pour pouvoir **négliger l'effet Doppler**, il faut que la composante de vitesse v_{xi} de l'atome parallèle à la direction de propagation de l'onde évanescente satisfasse

$$v_{xi} \ll \frac{\Delta}{q}. \tag{2.11}$$

Cette condition est en fait reliée à la précédente (2.9) ce qui apparaît de façon transparente si nous nous plaçons dans le référentiel de l'atome. A cause de l'effet DOPPLER, la fréquence de l'onde évanescente est réduite de $\Delta_D = qv_{xi}$, de sorte que le désaccord devient $\Delta \mapsto \Delta - \Delta_D$. Si maintenant (2.11) est violé, l'atome «voit» un champ lumineux dont la fréquence s'approche de la résonance atomique, si bien que le régime de faible saturation est remis en question.

L'hypothèse de **suivi adiabatique** sur le niveau habillé associé à l'état fondamental implique également une contrainte sur la vitesse atomique parce que les états habillés dans l'onde évanescente dépendent de la position. Nous tirons de (1.24) l'estimation suivante pour la probabilité de transition non adiabatique $w_{\text{n.ad.}}$:

$$w_{\text{n.ad.}} \leq \left(\frac{qv_{xi} + \kappa v_{zi}}{\Delta}\right)^2 \frac{s(0)}{2}. \tag{2.12}$$

Compte tenu de (2.9) (faible saturation) et de (2.11) (décalage DOPPLER négligeable), le terme faisant intervenir la composante de vitesse horizontale v_{xi} dans (2.12) est faible devant l'unité. Pour la composante normale v_{zi}, nous trouvons donc la limite suivante

$$v_{zi} \ll \frac{\Delta}{\kappa}\sqrt{\frac{2}{s(0)}}. \tag{2.13}$$

Finalement, nous pouvons **négliger l'émission spontanée** si le temps d'interaction τ_{int} (2.8) est suffisamment court de sorte que la probabilité $w_{\text{ém.s.}} \simeq \frac{1}{2}\Gamma s(0)\tau_{\text{int}}$ (1.28) est faible. En fait, l'on peut montrer en intégrant le taux d'émission spontanée le long de la trajectoire classique dans le miroir, que $w_{\text{ém.s.}}$ est donnée par[2] [22, 23]

$$w_{\text{ém.s.}} = \Gamma s(z_{\text{reb}})\tau_{\text{int}} = \frac{Mv_{zi}}{\hbar\kappa}\frac{\Gamma}{\Delta}, \tag{2.14}$$

et nous en déduisons la limite suivante pour la composante normale de la vitesse :

$$v_{zi} \ll \frac{\hbar\kappa}{M}\frac{\Delta}{\Gamma} \tag{2.15}$$

Le résultat (2.15) montre que pour une vitesse incidente grande devant la «vitesse de recul» $\hbar\kappa/M$ (ce qui est généralement le cas dans l'expérience), il est nécessaire de

---

[2] La probabilité d'émission spontanée (2.14) augmente avec la vitesse parce que l'atome entre alors plus profondément dans l'onde évanescente où il est soumis à un champ lumineux plus intense. Plus précisément, le taux d'émission spontanée au point de rebroussement est donné par $\frac{1}{2}\Gamma s(z_{\text{reb}}) \approx \Gamma(E_{zi}/\hbar\Delta)$, il augmente donc plus vite avec v_{zi} que ne décroît le temps d'interaction $\tau_{\text{int}} \propto 1/v_{zi}$.

Atome	^{4}He*	^{20}Ne*	^{22}Na	^{85}Rb	^{137}Cs
λ_L	1 080 nm	640 nm	589 nm	780 nm	852 nm
$\Gamma/(\hbar k_L^2/2M)$	40	340	400	1530	2570

Tableau 2.1: Rapports entre la largeur naturelle Γ et la fréquence de recul $\hbar k_L^2/2M$ (le «paramètre de masse» [91]) pour quelques atomes et transitions utilisés en optique atomique.

se placer dans le régime $\Delta \gg \Gamma$ pour que la réflexion soit possible avec une faible probabilité d'émission spontanée.

La plus restrictive des conditions (2.13) et (2.15) est déterminée d'une part, par le paramètre de saturation $s(0)$ et d'autre part, par le rapport sans dimension $\Gamma/(\hbar\kappa^2/2M)$. Nous en donnons au tableau 2.1 quelques valeurs pour quelques atomes et transitions fréquemment utilisés dans la manipulation d'atomes par laser, en prenant $\kappa = 2\pi/\lambda_L$.

2.3 Le potentiel de VAN DER WAALS

Nous étudions maintenant comment la barrière de potentiel du miroir à atomes est modifiée par l'interaction attractive de VAN DER WAALS avec la surface du diélectrique. En particulier, nous identifions un régime où cette interaction est faible devant le potentiel dipolaire.

2.3.1 Comparaison au potentiel dipolaire

L'interaction de VAN DER WAALS modifie la barrière de potentiel en lui ajoutant un potentiel de la forme

$$V_{\rm vdW}(z) = -\frac{c_3}{z^3}, \tag{2.16}$$

où le coefficient c_3 est de l'ordre de $\hbar\Gamma/k_L^3$ [38, 92]. L'interaction de VAN DER WAALS a son origine dans les fluctuations quantiques du moment dipolaire de l'atome. L'atome crée alors un champ électromagnétique qui est réfléchi par la surface du diélectrique et interagit de nouveau avec le dipôle atomique. L'expression (2.16) pour le potentiel de VAN DER WAALS est correcte dans la limite «électrostatique» où le temps de propagation du champ électromagnétique de l'atome vers l'interface est beaucoup plus court que la période-type des transitions dipolaires électriques de l'atome. Cette limite est vérifiée si la distance z de l'atome de l'interface est plus petite que la longueur d'onde optique réduite $\lambda_L/2\pi$ des transitions de résonance importantes.

Nous allons supposer dans ce mémoire que l'interaction de VAN DER WAALS est «faible» devant l'interaction avec le champ lumineux. Pour donner un premier critère quantitatif, comparons l'énergie incidente E_{zi} au potentiel de VAN DER WAALS

$V_{\mathrm{vdW}}(z_{\mathrm{reb}})$ au point de rebroussement que l'on calcule d'après (2.7)

$$\frac{V_{\mathrm{vdW}}(z_{\mathrm{reb}})}{E_{zi}} = \frac{c_3(2\kappa)^3}{E_{zi}} \left(\log \frac{V_{\mathrm{max}}}{E_{zi}}\right)^{-3}. \tag{2.17}$$

L'interaction de VAN DER WAALS est donc négligeable si le potentiel dipolaire et l'énergie incidente sont plus grands que l'échelle caractéristique

$$V_{\mathrm{max}} > E_{zi} \gg c_3(2\kappa)^3 \sim \hbar\Gamma \left(\frac{\kappa}{k_L}\right)^3. \tag{2.18}$$

Pour une estimation plus précise, notons que la barrière de potentiel du miroir est modifiée par l'interaction de VAN DER WAALS de façon considérable (voir la figure 2.2) : le potentiel présente un sommet à une distance z_s de l'interface de l'ordre de $\lambda_L/2\pi$, et une pente très raide dans la région $z < z_s$. La hauteur de la barrière de potentiel est donc réduite, ce que l'on a pu observer expérimentalement dans notre groupe à Orsay[3] [39]. La modification de la barrière est néanmoins négligeable, si l'énergie incidente E_{zi} est bien inférieure à la hauteur V_s de la barrière. Dans ce régime, l'atome rebrousse chemin loin de la position z_s du sommet. Dans la suite de ce paragraphe, nous évaluons la position et la hauteur du sommet de la barrière.

2.3.2 Le sommet de la barrière de potentiel

La position du sommet est déterminée par la condition que le gradient du potentiel total s'annule :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[V_{\mathrm{vdW}}(z) + V(z)\right]_{z_s} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad (2\kappa z_s)^4\, \mathrm{e}^{-2\kappa z_s} = 3\frac{\hbar\gamma}{V_{\mathrm{max}}}, \tag{2.19}$$

où nous avons introduit la quantité $\hbar\gamma = c_3(2\kappa)^3$ qui est de l'ordre de $\hbar\Gamma$. La solution z_s de l'équation (2.19) permet d'exprimer la hauteur V_s du sommet de la barrière de deux manières équivalentes :

$$V_s = V_{\mathrm{max}}\, \mathrm{e}^{-2\kappa z_s}\left(1 - \frac{2\kappa z_s}{3}\right) = \frac{\hbar\gamma}{(2\kappa z_s)^3}\left(\frac{3}{2\kappa z_s} - 1\right). \tag{2.20}$$

Nous constatons que dans le cas particulier $\kappa z_s = \frac{3}{2}$, le sommet de la barrière se trouve à l'énergie nulle (la courbe en tirets épais sur la figure 2.2). D'après (2.19), cette situation est réalisée pour un potentiel dipolaire

$$V_{\mathrm{max}} = \hbar\gamma \left(\frac{\mathrm{e}}{3}\right)^3 \approx 0.74\,\hbar\gamma. \tag{2.21}$$

[3] Dans cette expérience, il fut possible de mesurer l'écart entre la forme électrostatique (2.16) du potentiel de VAN DER WAALS et un calcul plus exacte de l'électrodynamique quantique, qui tient compte du temps fini de propagation du champ électromagnétique entre l'atome et la surface. Dans ce paragraphe, nous nous restreignons néanmoins à la limite électrostatique pour simplifier les calculs.

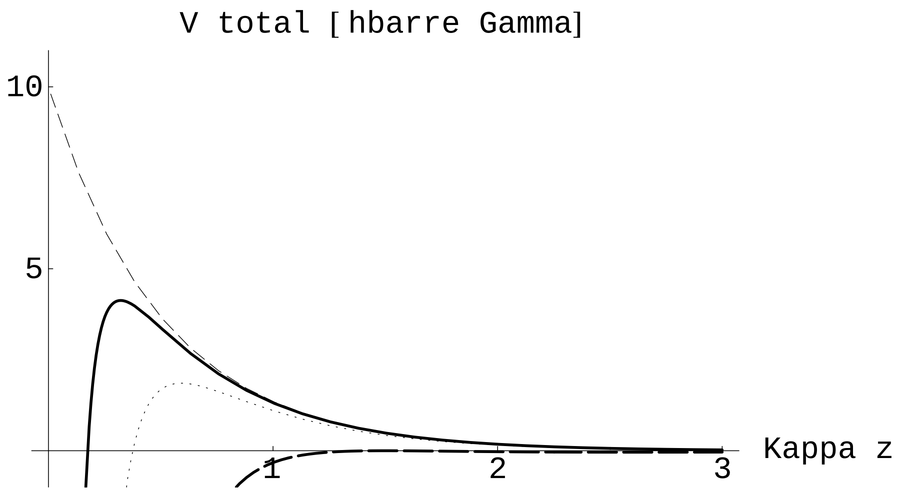

Figure 2.2: Barrière de potentiel du miroir à atomes, en tenant compte de l'interaction de VAN DER WAALS *avec le diélectrique. Le potentiel est donné en unités de $\hbar\Gamma$ et la distance z en unités de $1/\kappa$. Le potentiel dipolaire à l'interface est fixé à $V_{\max} = 10\,\hbar\Gamma$, et le coefficient c_3 varie.*
Tirets fin : sans interaction de VAN DER WAALS, *$c_3 = 0$; trait plein : $c_3(2\kappa)^3 = 0.3\,\hbar\Gamma$; pointillées : $c_3(2\kappa)^3 = 2\,\hbar\Gamma$; tirets épais : $c_3(2\kappa)^3 = (3/\mathrm{e})^3 V_{\max} \approx 13\,\hbar\Gamma$. Pour cette valeur, le sommet de la barrière se trouve à l'énergie $V_s = 0$, à la position $z_s = \frac{3}{2}\kappa^{-1}$.*

Pour un potentiel dipolaire $V_{\max}$ inférieur à ce seuil, le potentiel total est négatif à toutes les distances. Afin de réaliser une barrière de potentiel, il faut donc que $V_{\max}$ soit beaucoup plus grand que $\hbar\Gamma$ environ.

Considérons maintenant la limite d'un potentiel dipolaire très élevé, $V_{\max} \gg \hbar\gamma$. L'on s'attend alors à ce que l'on se rapproche d'un potentiel exponentiel pur. Cependant, le potentiel de VAN DER WAALS, à cause de sa divergence à $z = 0$, l'emportera toujours sur le potentiel dipolaire au voisinage de l'interface. Pour un potentiel dipolaire $V_{\max}$ élevé, nous pouvons tout au plus supposer que la position du sommet z_s est faible devant $1/\kappa$. Dans cette limite, l'équation (2.19) admet la solution suivante (en remplaçant l'exponentielle par l'unité)

$$V_{\max} \gg \hbar\gamma : \quad z_s \simeq \frac{1}{2\kappa}\left(\frac{3\hbar\gamma}{V_{\max}}\right)^{1/4}. \tag{2.22}$$

Nous constatons que la distance du sommet z_s diminue assez faiblement avec le potentiel dipolaire $V_{\max}$. En reportant la solution approchée (2.22) dans la première des expressions (2.20), nous trouvons que la hauteur du sommet vaut

$$V_{\max} \gg \hbar\gamma : \quad V_s \simeq V_{\max}\left\{1 - \frac{1}{3}\left(\frac{3\hbar\gamma}{V_{\max}}\right)^{1/4}\right\}\exp\left[-\left(\frac{3\hbar\gamma}{V_{\max}}\right)^{1/4}\right]. \tag{2.23}$$

Mis à part un facteur correctif (en accolades), la hauteur de la barrière de potentiel est donc donnée par la valeur du potentiel exponentiel à la position z_s (2.22) du sommet. En particulier, V_s est inférieur à la hauteur $V_{\max}$ du seul potentiel dipolaire. Dans l'expérience de notre groupe, le rapport $V_{\max}/V_s$ est généralement de l'ordre de quelques unités [39] et dépend faiblement de $V_{\max}$ [voir (2.22)].[4]

Sur la figure 2.3, nous comparons l'expression (2.23) pour la hauteur V_s de la barrière de potentiel à la solution exacte donnée par (2.19, 2.20). La hauteur est tracée en fonction du potentiel dipolaire $V_{\max}$, pour quelques valeurs du paramètre $\gamma/\Gamma = c_3(2\kappa)^3/\hbar\Gamma$. La droite en tirets fins correspond à l'estimation $V_s = V_{\max}$ qui ignore l'interaction de VAN DER WAALS. Nous constatons que l'expression asymptotique (2.23) donne une bonne approximation de la hauteur de la barrière, si l'énergie $c_3(2\kappa)^3$ est faible devant le potentiel dipolaire $V_{\max}$ (les courbes en trait plein et en pointillées sur la figure 2.3).

Conclusion

La réflexion d'un atome par le miroir à onde évanescente peut être décrite par un potentiel exponentiel répulsif si le désaccord du champ lumineux est grand et positif. La condition la plus restrictive pour le désaccord est celle d'une probabilité d'émission spontanée faible (2.14) :

$$\frac{\Delta}{\Gamma} \gg \frac{v_{zi}}{\hbar\kappa/M} \gg 1, \tag{2.24}$$

étant donné que la vitesse incidente des atomes est généralement grande devant la vitesse de recul $\hbar\kappa/M$.

La présence du potentiel de VAN DER WAALS implique qu'il faut un potentiel dipolaire avec une valeur à l'interface $V_{\max}$ d'environ $\hbar\Gamma$ au moins, pour que le potentiel total ait une valeur maximale positive. Dans l'expérience de notre groupe, une contrainte comparable provient de la condition de réflexion parce que l'énergie incidente E_{zi} est de l'ordre de quelques $\hbar\Gamma$. Avec (2.9, 2.10, 2.24), nous trouvons les conditions suivantes pour l'intensité lumineuse I_L de l'onde évanescente

$$\frac{4\Delta^2}{\Gamma^2} \gg \frac{I_L}{I_{\text{sat}}} \gg \frac{\Delta}{\Gamma} \gg 1. \tag{2.25}$$

Dans la pratique, des intensités lumineuses assez élevées sont alors nécessaires, ce qui a conduit au développement de techniques d'exaltation du champ évanescent [17, 18, 93, 20].

Dans la limite d'un potentiel dipolaire fort, le sommet de la barrière de potentiel se trouve au voisinage de la surface, et sa position dépend peu de la valeur exacte du potentiel dipolaire. La hauteur de la barrière est réduite d'un facteur approximativement constant qui est généralement de l'ordre de quelques unités. Cependant, si l'atome rebrousse chemin loin du sommet de la barrière, le potentiel de VAN DER WAALS

[4] Pour faire varier le rapport $V_{\max}/V_s$, un moyen expérimental est de choisir des valeurs différentes pour la constante de décroissance κ ce qui modifie le paramètre $\hbar\gamma = c_3(2\kappa)^3$.

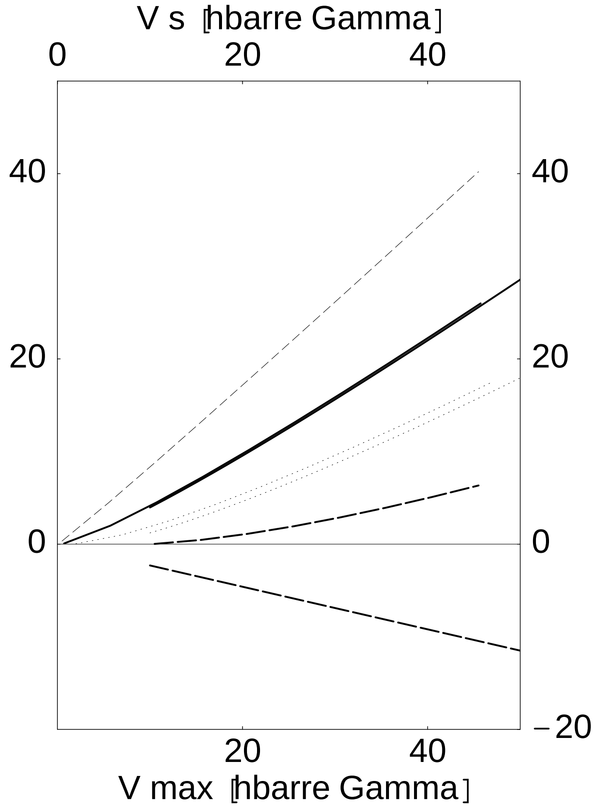

Figure 2.3: Hauteur V_s de la barrière de potentiel du miroir en fonction du potentiel dipolaire $V_{\max}$ à l'interface, pour quelques valeurs du coefficient c_3 de l'interaction de VAN DER WAALS *(2.16). Les énergies sont données en unités de $\hbar\Gamma$, et les chiffres sur les courbes donnent le rapport $\gamma/\Gamma = c_3(2\kappa)^3/\hbar\Gamma$.*
La droite en tirets fins, $V_s = V_{\max}$, ignore l'interaction de VAN DER WAALS *: $c_3 = 0$. Trait plein : $c_3(2\kappa)^3 = 0.3\,\hbar\Gamma$, l'expression asymptotique (2.23) [représentée pour $V_{\max} > 10\,\hbar\Gamma$] se confond presque avec le résultat exacte. Pointillées : $c_3(2\kappa)^3 = 2\,\hbar\Gamma$, avec un écart plus grand par rapport à (2.23). Longs tirets : $c_3(2\kappa)^3 \simeq 13\,\hbar\Gamma$; pour une valeur aussi grande du potentiel de* VAN DER WAALS*, l'estimation asymptotique (2.23) n'est plus valable (la courbe négative).*

représente une faible déformation du potentiel dipolaire que nous pouvons négliger. Ce régime correspond à une énergie incidente E_{zi} (le long de la normale au miroir) faible devant la hauteur de la barrière.

Chapitre 3

Réflexion d'atomes par un potentiel dipolaire répulsif

Présentation

En annexe de ce chapitre, nous reproduisons l'article «*Phase shifts of atomic de Broglie waves at an evanescent wave mirror*» par C. H., J.-Y. COURTOIS, R. KAISER, C. WESTBROOK et A. ASPECT, qui a été publié dans le numéro spécial *Laser cooling and trapping* de la revue *Laser Physics* **4** (no. 5), pp. 1042–1049 (1994).[1] Nous étudions dans ce travail la réflexion d'une onde atomique par le potentiel dipolaire de l'onde évanescente. Grâce au fait que ce potentiel a une forme analytique simple (2.4),

$$V(z) = V_{\max}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}, \tag{3.1}$$

il est possible de résoudre complètement le problème mécanique, et ce aussi bien du point de vue classique que quantique. Nous résumons ici les résultats que l'on obtient d'une part pour le mouvement classique dans la barrière de potentiel et d'autre part pour les fonctions d'onde quantiques.

Le processus classique de réflexion a lieu sur une échelle de *temps caractéristique* $\tau_{\rm int}$ donnée par le temps nécessaire pour traverser la profondeur de pénétration $1/\kappa$ de l'onde évanescente à la vitesse incidente v_{zi} [voir l'équation (**Pha** 2)] :

$$\tau_{\rm int} = \frac{1}{\kappa v_{zi}}, \tag{3.2}$$

comme nous l'avons anticipé à l'équation (2.8). Dans la région asymptotique où le potentiel s'annule, l'atome est en mouvement rectiligne et uniforme longtemps avant et après la réflexion. La figure **Pha** 1 montre que les deux branches asymptotiques de la trajectoire se croisent à une distance $\zeta_{\rm cl}$ (**Pha** 5) de la surface. Du point de vue classique, nous pouvons donc nous représenter le miroir à onde évanescente par un

[1] Dans ce mémoire, nous utilisons le signet «**Pha**» pour faire référence aux équations, figures et pages de cette publication.

miroir effectif situé à cette position : lorsque l'on ignore la dynamique détaillée du processus de réflexion, l'atome réfléchi sort du potentiel du miroir de la même façon que s'il avait rencontré une barrière de potentiel infinie (un «miroir parfait») située à $\zeta_{\rm cl}$.

Du point de vue quantique, l'atome est décrit par une *fonction d'onde* $\psi_{k_{zi}}(z)$ qui est une solution de l'équation de SCHRÖDINGER stationnaire pour la barrière de potentiel du miroir. Dans la région asymptotique, $\psi_{k_{zi}}(z)$ est une superposition d'une onde incidente et d'une onde réfléchie dont les vecteurs d'onde valent $\mp k_{zi}$ et où k_{zi} est relié à la vitesse incidente par $k_{zi} = Mv_{zi}/\hbar$. Nous définissons le *déphasage à la réflexion* $\Delta\varphi$ par le comportement asymptotique suivant de la fonction d'onde $\psi_{k_{zi}}(z)$ [voir (1.58) et (**Pha** 8, **Pha** 18)] :

$$z \to +\infty : \quad \psi_{k_{zi}}(z) \propto \left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_i z} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_i z + \Delta\varphi)} \right]. \tag{3.3}$$

Dans cette expression, la deuxième exponentielle représente l'onde réfléchie, et le déphasage $\Delta\varphi$ donne la correction de sa phase par rapport à la réflexion instantanée[2] par un miroir parfait situé sur la surface du diélectrique $z = 0$.

Nous montrons à l'équation (**Pha** 19) de l'annexe 3.A que le déphasage $\Delta\varphi$ est de l'ordre de la phase k_{zi}/κ associée à la propagation libre de l'onde incidente à travers la profondeur de pénétration $1/\kappa$ de l'onde évanescente. Dans le *régime semi-classique* $k_{zi} \gg \kappa$, où la longueur d'onde atomique incidente est beaucoup plus petite que $1/\kappa$, $\Delta\varphi$ est donc grand devant l'unité. A l'équation (**Pha** 20) du paragraphe **Pha** 3.2, nous trouvons que dans cette limite, la solution exacte de l'équation de SCHRÖDINGER et l'approximation BKW donnent un déphasage identique, à une correction de l'ordre de $(k_{zi}/\kappa)^{-1}$ près. En particulier, ce déphasage dépend de la vitesse incidente, et par conséquent, la réflexion d'atomes par le miroir est dispersive.

Dans la *limite quantique* $k_{zi} \ll \kappa$, où la longueur d'onde atomique est plus grande que $1/\kappa$, le développement asymptotique (3.3) de la fonction d'onde peut s'écrire sous la forme suivante

$$\left. \begin{array}{c} z \to +\infty, \\ k_{zi} \ll \kappa \end{array} \right\} : \quad \psi_{k_{zi}}(z) \propto \sin\left[k_{zi}(z - \zeta_{\rm eff}^{\rm Schr}) \right]. \tag{3.4}$$

Le miroir à onde évanescente se comporte alors comme un miroir parfait situé à la position fixe $\zeta_{\rm eff}^{\rm Schr}$ (**Pha** 22b), avec

$$\zeta_{\rm eff}^{\rm Schr} = \frac{1}{2\kappa} \log\left(\mathrm{e}^{2\gamma} \frac{V_{\rm max}}{2\hbar^2\kappa^2/M} \right). \tag{3.5}$$

[$\gamma \approx 0.577$ est la constante d'EULER.] Cette position est proche du point de rebroussement d'un atome avec une vitesse incidente égale à la «vitesse de recul» $\hbar\kappa/M$. Comme $\zeta_{\rm eff}^{\rm Schr}$ ne dépend plus de la vitesse incidente, nous constatons que le miroir devient non dispersif dans le régime quantique.

[2] Le signe $-$ de l'onde réfléchie provient du choix d'une barrière de potentiel infinie pour donner la référence de phase.

Notons finalement l'expression exacte de la fonction d'onde atomique pour la réflexion par une onde évanescente simple. A la différence de l'article en annexe [les expressions (**Pha** 17, **Pha** B8)], nous avons choisi dans ce mémoire une normalisation différente, où $\psi_{k_{zi}}(z)$ tend dans la région asymptotique vers une onde stationnaire d'amplitude unité :

$$z \to +\infty : \quad \psi_{k_{zi}}(z) = \sin\Big[k_i z + \tfrac{1}{2}\Delta\varphi\Big] \,. \tag{3.6}$$

Avec cette normalisation, la fonction d'onde est donnée par

$$\psi_{k_{zi}}(z) = \sqrt{\frac{k_{zi}}{\pi\kappa}\sinh\frac{\pi k_{zi}}{\kappa}}\; K_{\mathrm{i}k_{zi}/\kappa}[u(z)] \,, \tag{3.7}$$

où $K_{\mathrm{i}k_{zi}/\kappa}(u)$ est une fonction de BESSEL modifiée de la deuxième espèce[3] dont l'argument $u(z)$ est défini par

$$u(z) \equiv \left(\frac{V_{\mathrm{max}}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}}{\hbar^2\kappa^2/2M}\right)^{1/2} \,. \tag{3.8}$$

La fonction d'onde (3.7) est représentée sur la figure **Pha** 2, pour un vecteur d'onde incident assez faible, $k_{zi} = 3\,\kappa$. La figure 3.1 correspond à un vecteur d'onde plus grand, $k_{zi} = 30\,\kappa$. Nous observons l'augmentation de l'amplitude de la fonction d'onde autour du point de rebroussement classique, sans toutefois qu'elle y présente une singularité comme c'est le cas pour la solution donnée par l'approximation BKW (la courbe en tirets sur la figure **Pha** 2).

> **Remarque.** Après la publication de l'article reproduit dans l'annexe, nous avons pris connaissance du fait que les premiers à écrire les fonctions d'onde (3.7) dans le potentiel exponentiel (3.1) furent J. M. JACKSON et N. F. MOTT en 1932 : ⟪*Energy exchange between inert gas atoms and a solid surface*⟫, *Proc. Roy. Soc. (London) Ser. A* **137**, pp. 703–717.

Erratum. La note de bas de page no. 7 de l'annexe 3.A devrait être une référence bibliographique à l'article ⟪*Resonant enhancement of evanescent waves with a thin dielectric waveguide*⟫ par R. KAISER, Y. LÉVY, N. VANSTEENKISTE, A. ASPECT, W. SEIFERT, D. LEIPOLD et J. MLYNEK, *Opt. Commun.* **104**, 234 (1994).

Notations. Nous donnons au tableau suivant une synopse des notations utilisées dans l'article **Pha** de l'annexe 3.A et dans le présent mémoire.

Grandeur physique	dans ce mémoire		dans l'annexe 3.A	
potentiel à $z = 0$	V_{max}	éq. (3.1)	$p_{\mathrm{max}}^2/2M$	éq. (**Pha** 1)
vitesse incidente	v_{zi}		p_∞/M	
distance de rebroussement	z_{reb}	éq. (2.7)	z_0	éq. (**Pha** 3)
temps de réflexion	τ_{int}	éq. (2.8)	τ_{refl}	éq. (**Pha** 4)

[3]*Handbook of Mathematical Functions*, édité par M. ABRAMOWITZ et I. STEGUN (Dover, New York, 1965), chap. 9.6 et 9.7.

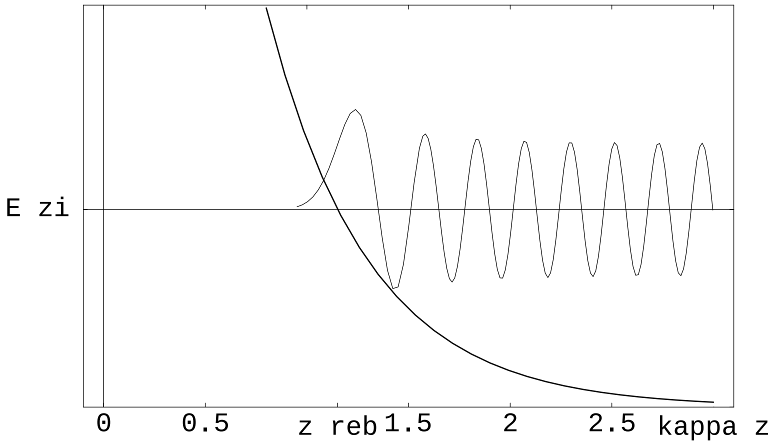

Figure 3.1: Fonction d'onde atomique dans la barrière de potentiel de l'onde évanescente. Le vecteur d'onde incident vaut $k_{zi} = 30\,\kappa$ et $V_{\rm max} = 10\,E_{zi}$ de sorte que $\lambda_{\rm dB} \approx 0.21\,\kappa^{-1}$ et $z_{\rm reb} \approx 1.15\,\kappa^{-1}$. La position est donnée en unités de $1/\kappa$.

Annexe

3.A *Phase shifts of atomic de Broglie waves at an evanescent wave mirror* (Pha)

Ce papier a été publié dans un numéro spécial (Atom Optics and Interferometry) de la revue *Laser Physics* **4** (1994) 1042. Une version électronique en est accessible via arxiv.org/quant-ph/0301080.

Chapitre 4

Réflexion quantique d'atomes par un potentiel dipolaire attractif

Présentation

La limite quantique de la réflexion d'atomes par le miroir à onde évanescente est caractérisée par une longueur d'onde atomique incidente beaucoup plus grande que la profondeur de pénétration de l'onde évanescente. Au chapitre précédent, nous avons constaté que dans ce régime, la réflexion par le miroir à atomes devient équivalente à la réflexion par une barrière de potentiel infinie. Nous considérons dans ce chapitre l'interaction entre une onde atomique et une onde évanescente avec un désaccord «rouge» ; le potentiel dipolaire est alors un potentiel attractif qui attire les atomes vers la surface du diélectrique. Pour une particule classique, aucune réflexion ne peut se produire dans un tel potentiel. Par contre, la réflexion partielle d'une onde atomique est effectivement possible avec une probabilité non nulle si l'on se place dans la limite quantique où la barrière de potentiel varie rapidement à l'échelle de la longueur d'onde atomique. Nous montrons que dans ce régime, le potentiel dipolaire attractif se comporte comme une marche de potentiel. Ces résultats sont exposés en plus grand détail dans l'article «*Quantum reflection: atomic matter-wave optics in an attractive exponential potential*» par C. H., C. I. WESTBROOK, A. ASPECT, publié dans le *Journal of the Optical Society of America B* **13**, pp. 233–243 (février 1996), que nous reproduisons en annexe 4.A.[1]

Expérimentalement, le régime quantique n'est pas facile à réaliser parce qu'il faut que l'atome soit incident sur le miroir avec une composante de vitesse normale bien en-dessous de la «vitesse de recul» $\hbar\kappa/M$. A titre d'exemple, même une vitesse incidente $v_{zi} = \frac{1}{2}\hbar\kappa/M$ donne un coefficient de réflexion en intensité qui vaut seulement $R = \mathrm{e}^{-\pi} \approx 4\,\%$ [voir l'équation (**QRef** 2.16)]. Il est donc préférable d'utiliser des atomes très legers dont la vitesse de recul est grande. Ensuite, afin de réduire la com-

[1]Nous utilisons le signet «**QRef**» dans ce mémoire pour faire référence aux équations et figures de cette publication.

posante normale de la vitesse incidente, il convient de réfléchir les atomes en incidence rasante ou bien de placer le «miroir attractif» au sommet d'une «fontaine atomique» où les atomes sont lancés vers le haut dans le champ de pesanteur [95, 8]. Notons finalement que pour éliminer l'émission spontanée, l'on peut procéder de façon analogue au miroir à atomes habituel, en choisissant un désaccord beaucoup plus grand que la largeur naturelle de l'état excité. Il est cependant nécessaire de prendre un désaccord encore plus grand que pour le miroir répulsif parce que le temps d'interaction de l'atome est plus long, étant donné sa faible vitesse incidente [voir (1.28)].

Estimation de l'influence de l'interaction de VAN DER WAALS

L'interaction de VAN DER WAALS a tendance a rendre impossible la réflexion quantique parce qu'elle a une portée plus longue que le potentiel exponentiel de l'onde évanescente. En s'approchant du miroir, l'atome est donc accéléré par ce potentiel, et si son énergie cinétique augmente au-delà de l'«énergie de recul» $\hbar^2\kappa^2/2M$, la probabilité de réflexion devient négligeable.

Pour une estimation plus précise, nous nous plaçons à la position de l'«horizon» $\zeta_{\rm hor}$ de la trajectoire classique que nous introduisons à l'équation (**QRef** 2.4). A partir de cette position environ, le potentiel dipolaire attractif de l'onde évanescente commence a modifier sensiblement la trajectoire classique de l'atome (voir la figure **QRef** 1). En imposant qu'à l'horizon, le potentiel de VAN DER WAALS (2.16) soit faible devant l'énergie de recul, nous trouvons la condition

$$\left(\log\frac{V_{\rm max}}{4E_{zi}}\right)^3 \gg \frac{c_3(2\kappa)^3}{\hbar^2\kappa^2/2M} \sim \frac{\Gamma}{\hbar k_L^2/2M}\frac{\kappa}{k_L}, \tag{4.1}$$

où $-V_{\rm max}$ est la valeur du potentiel dipolaire à la surface $z = 0$ du diélectrique et E_{zi} l'énergie cinétique incidente des atomes. Pour l'atome d'Hélium qui est très leger, le paramètre de masse vaut $2M\Gamma/\hbar k_L^2 \approx 40$ (voir au tableau 2.1), de sorte que la condition (4.1) est satisfaite pour $V_{\rm max} \gg 120\, E_{zi}$ (avec $\kappa = k_L$).[2] Pour une barrière de potentiel répulsive, des valeurs beaucoup plus grandes de $V_{\rm max}$ sont couramment utilisées dans les expériences de réflexion d'atomes. Afin d'éliminer l'influence de l'interaction de VAN DER WAALS, l'on peut donc utiliser un potentiel dipolaire du même ordre de grandeur que pour les expériences du miroir à atomes. La plus grande difficulté expérimentale reste la réalisation d'une vitesse incidente suffisamment faible pour entrer dans le régime quantique.

[2]Pour l'atome de Rubidium par contre, qui est plus lourd, nous trouvons la limite $V_{\rm max} \gg 4 \times 10^5\, E_{zi}$, ce qui représente une limite plus stricte que celle, $V_{\rm max} \gg \hbar^2\kappa^2/2M$, venant du potentiel exponentiel tronqué étudié au paragraphe **QRef** 5. Des techniques d'exaltation de l'onde évanescente semblent nécessaires pour se placer dans cette limite.

Notations. Dans l'annexe 4.A, nous nous servons des notations v_z et k_z pour la vitesse atomique incidente et le vecteur d'onde incident, alors que dans le présent mémoire, nous utilisons les symbôles v_{zi} et k_{zi}.
La quantité τ qui figure à l'équation (**QRef** 2.3) représente l'échelle de temps caractéristique pour le mouvement classique, $\tau = 1/\kappa v_{zi}$. L'orientation de l'axe Oz est renversée dans l'article **QRef** : l'atome est incident de la région $z \to -\infty$, et l'onde évanescente attractive se trouve dans le demi-espace $z < 0$.

Annexe

4.A *Quantum reflection : atomic matter-wave optics in an attractive exponential potential* (QRef)

Ce papier est accessible dans le *Journal of the Optical Society of America B* **13** (1996) 233.

Conclusion de la première partie

Le miroir à onde évanescente permet de réfléchir spéculairement un atome si dans la direction perpendiculaire au miroir, l'énergie incidente des atomes est en-dessous de la hauteur maximale de la barrière de potentiel (chap. 2). Les réalisations expérimentales du miroir à atomes se situent généralement dans le régime semi-classique qui est défini par une longueur d'onde atomique incidente beaucoup plus grande que la profondeur de pénétration de l'onde évanescente. Le déphasage de l'onde réfléchie est alors grand devant l'unité, et il dépend de l'énergie incidente (chap. 3). Le miroir à atomes est donc dispersif. C'est seulement dans la limite quantique où la vitesse incidente a une composante normale en-dessous de la »vitesse de recul« $\hbar\kappa/M$, que le miroir devient non dispersif : la réflexion est alors équivalente à celle par un miroir parfait situé à une distance de l'ordre de la profondeur de pénétration $1/\kappa$ de la surface du diélectrique. Dans le régime quantique, nous prédisons qu'il est également possible d'observer la réflexion partielle d'une onde atomique par un potentiel dipolaire *attractif* avec une probabilité non nulle (chap. 4). Un tel potentiel est réalisé par une onde évanescente désaccordée en-dessous de la fréquence de résonance atomique.

En supposant que la barrière de potentiel du miroir à atomes est donnée par le seul potentiel dipolaire et dans la limite de faible saturation, des solutions exactes à l'équation de SCHRÖDINGER peuvent être données [à l'équation (3.7)]. Nous allons nous servir de ces fonctions d'onde tout au long de ce mémoire.

Notons pour finir que le déphasage de l'onde atomique réfléchie $\Delta\varphi$ [équations (**Pha** 9, **Pha** 19)] présente une grande sensibilité aux variations $\delta V_{\max}$ de la hauteur du potentiel dipolaire : la variation correspondante du déphasage $\delta\,\Delta\varphi$ vaut

$$\delta\,\Delta\varphi = \frac{M v_{zi}}{\hbar\kappa}\frac{\delta V_{\max}}{V_{\max}},$$

où le rapport $M v_{zi}/\hbar\kappa$ est grand devant l'unité dans le régime semi-classique. Dans la partie suivante, nous verrons qu'à cause de cette sensibilité, une faible modulation spatiale de l'intensité de l'onde évanescente est suffisante pour diffracter l'atome de façon efficace.

Seconde partie

Diffraction d'atomes par une onde évanescente stationnaire

Introduction à la seconde partie

Nous nous tournons dans cette partie (les chapitres 5 à 12) vers la diffraction d'une onde atomique par l'onde évanescente stationnaire. C'est parce que l'intensité lumineuse présente alors une modulation spatiale que le miroir à atomes se transforme en un réseau de diffraction en réflexion. Comme dans la partie précédente, nous allons supposer que les atomes incidents sont suffisamment lents pour qu'ils puissent être réfléchis par un champ lumineux à grand désaccord, dans le régime de saturation faible. Le mouvement de l'atome est alors déterminé par un potentiel scalaire, le potentiel dipolaire qui correspond au déplacement lumineux de l'état atomique fondamental. Le problème de la diffraction de l'onde atomique constitue ainsi un exemple de la théorie quantique de la diffusion par un potentiel périodique planaire.

D'un point de vue historique, la théorie de la diffraction en réflexion d'une onde de matière par un potentiel périodique remonte aux années trente de ce siècle. Elle fut développée suite aux expériences de O. STERN, F. KNAUER et R. FRISCH à Hamburg (Allemagne), où un jet atomique thermique fut réfléchi et diffracté par une surface cristalline [96, 97]. En 1932, J. M. JACKSON et N. F. MOTT étudièrent l'échange d'énergie entre la surface et l'atome incident [68] ; ils furent les premiers à se servir d'un potentiel répulsif avec une forme exponentielle pour décrire l'interaction de l'atome avec la surface. En 1936 et 1937, A. F. DEVONSHIRE et J. E. LENNARD-JONES calculèrent l'efficacité de la diffraction d'une onde atomique dans l'approximation de BORN [56, 57], en utilisant un potentiel de MORSE pour tenir compte à la fois de l'attraction de VAN DER WAALS à longue distance et de la répulsion par la surface à courte distance. La formulation moderne de la théorie de la diffraction d'un atome par une surface fut donnée en 1970 par N. CABRERA, V. CELLI, F. O. GOODMAN et R. MANSON (« *Scattering of atoms by solid surfaces* »[1]), une fois que des expériences plus fines de diffraction d'atomes par des surfaces furent possibles. Dans la suite, de nombreux modèles théoriques simplifiés furent introduits et confrontés aux observations expérimentales (voir l'article de revue par H. HOINKES [55] pour davantage de références). Un aspect important de la diffraction par une surface cristalline est qu'il faut généralement tenir compte du mouvement thermique de la surface, en introduisant des moyennes appropriées dans la théorie.

Revenons maintenant aux travaux sur la diffraction d'atomes par un champ lumineux évanescent. C'est en 1989 que J. V. HAJNAL et G. I. OPAT de l'Université de

[1] *Surface Science* **19**, 67–92 (1970).

Melbourne (Australie) proposent d'utiliser l'onde évanescente stationnaire comme un réseau de diffraction en réflexion pour un jet atomique («*Diffraction of atoms by a standing evanescent light wave – a reflection grating for atoms*»[2]). Ils s'intéressent en particulier au cas d'un jet thermique en incidence rasante et développent une théorie à partir d'équations d'ondes couplées pour un atome à deux niveaux. Des populations diffractées importantes sont prédites pour l'état excité et pour l'état fondamental dans l'ordre $+2$. Quelques mois plus tard cependant, il fut impossible d'observer la diffraction dans l'expérience du groupe de G. I. OPAT [98]. Cet échec fut attribué aux imperfections expérimentales qui ne permirent pas de résoudre l'ordre de diffraction $+2$ parce que l'angle de diffraction se trouve alors entre le faisceau réfléchi spéculairement et la surface du diélectrique. La recherche de la diffraction d'un jet thermique en incidence rasante se poursuivit en 1993 et 1994 lorsque des résonances «Doppleron» furent observées dans la réflexion par une onde évanescente partiellement stationnaire par les groupes de J. BAUDON à l'Université de Paris-Nord (Villetaneuse) [18, 99] et de H.-A. BACHOR et K. G. H. BALDWIN de l'Université Nationale d'Australie (Canberra) [100]. Les Dopplerons sont des processus à plusieurs photons où l'état fondamental de l'atome est couplé de façon résonnante à l'état excité ; la réflectivité du miroir est alors réduite parce que l'état excité est attiré vers la surface. Par contre, aucune trace d'atomes diffractés ne put être décelée. En 1993 également, la théorie de R. DEUTSCHMANN, W. ERTMER et H. WALLIS, alors à l'Université de Bonn (Allemagne), prédit de faibles populations diffractées dans les ordres $-2, -4$ pour un jet atomique ralenti [78], Dans leur approche, ils utilisent les niveaux habillés dans l'onde évanescente à titre de potentiels adiabatiques ; l'atome est diffracté lorsqu'il passe d'une courbe de potentiel à une autre par une transition non adiabatique. Cette image a été utilisée par J. E. MURPHY, L. S. HOLLENBERG et A. E. SMITH de l'Université de Melbourne (Australie) pour interpréter les résultats qu'ils ont obtenus par une simulation numérique de l'expérience du groupe de H.-A. BACHOR sur les résonances Doppleron [101].

La première observation expérimentale de la diffraction d'atomes par l'onde évanescente stationnaire fut rapportée par le groupe de W. ERTMER de l'Université de Bonn en 1994 [12]. L'on utilisa alors un jet d'atomes ralenti et collimaté par refroidissement laser en incidence rasante. Le jet fut diffracté dans l'ordre -2, avec un rendement de quelques pour cent. En 1996, le groupe de V. LORENT de l'Université de Paris-Nord à Villetaneuse put observer des populations diffractées atteignant jusqu'à 40 % pour un jet d'atomes thermique [13]. Dans cette expérience, le plan d'incidence du jet a été tourné par rapport au plan d'incidence de l'onde évanescente stationnaire, de façon à réduire la vitesse atomique dans le plan du réseau. Le groupe de C. M. SAVAGE de l'Université Nationale d'Australie (Canberra) a publié des résultats de simulations numériques, en accord avec les expériences de H.-A. BACHOR [80] et de W. ERTMER [81]. Pour obtenir la diffraction dans les conditions de l'expérience de W. ERTMER, il fallut tenir compte de la structure magnétique des états atomiques

[2] *Optics Communications* **71**, 119–124 (1989).

fondamental et excité. Notons que R. DEUTSCHMANN et ses collègues à Bonn ont proposé une séparatrice atomique analogue en 1993 [79], où un atome avec plusieurs sous-niveaux magnétiques est réfléchi par une onde évanescente progressive à laquelle se superpose un champ magnétique.

Quant à la diffraction d'atomes en incidence normale, notre groupe à Orsay a tout récemment obtenu de premiers résultats.[3] La diffraction «dans le temps» par un miroir à onde évanescente avec une modulation temporelle fut réalisée en incidence normale par le groupe de J. DALIBARD du laboratoire KASTLER–BROSSEL de l'Ecole Normale Supérieure (Paris) [14, 85], suite à une proposition théorique de C. H., A. M. STEANE, R. KAISER et J. DALIBARD [102]. L'onde atomique réfléchie par le «miroir vibrant» est alors modulée en fréquence et ses bandes latérales ont des vitesses différentes dans la direction perpendiculaire au miroir. Des transferts de vitesse discretisés de plusieurs $\hbar\kappa/M$ ont été observés.

Notons finalement qu'à part l'onde évanescente stationnaire, d'autres réseaux de diffraction d'atomes ont été proposés. Citons les propositions du groupe de G. I. OPAT de 1992 [11] où figure en particulier un réseau de diffraction en réflexion basé sur un champ magnétique périodique. L'interaction du moment dipolaire magnétique de l'atome avec le champ conduit à un potentiel périodique répulsif pour des sous-niveaux magnétiques particuliers. Du point de vue mathématique, un tel réseau magnétique est décrit par un potentiel de forme similaire au potentiel dipolaire de l'onde évanescente stationnaire, mais à des échelles spatiales différentes. Rappelons que la réflexion d'atomes sur un tel miroir magnétique, sans diffraction, a été observée par le groupe de E. A. HINDS, alors à l'Université de Yale (Etats-Unis), en utilisant une bande magnétique [24], ainsi que par les groupes de P. HANNAFORD et G. I. OPAT de l'Université de Melbourne (Australie) où le miroir est réalisé par une disposition périodique d'aimants permanents [25].

Dans cette partie du présent mémoire, nous étudions la théorie de la diffraction d'une onde de matière par un potentiel exponentiel périodique scalaire. Par rapport à l'interaction d'un atome à deux niveaux avec une onde évanescente stationnaire, nous nous limitons ainsi au régime de faible saturation où le mouvement de l'atome est déterminé par le potentiel dipolaire; nous supposons que l'émission spontanée est négligeable. L'onde lumineuse sera décrite par un champ classique externe. Dans la plupart des cas, notre approche théorique sera motivée par une expérience où les atomes sont incidents au voisinage de la normale, telle qu'elle est réalisée dans les groupes de J. DALIBARD et de A. ASPECT. Nous emprunterons néanmoins volontiers des approches développées dans d'autres domaines de la physique, comme la diffusion d'atomes par des surfaces cristallines ou encore l'optique lumineuse.

Du point de vue théorique, la diffraction d'atomes dans le régime de faible saturation représente une situation modèle pour la théorie quantique de la diffusion. Elle permet donc d'étudier plusieurs limites différentes et complémentaires. Des exemples sont le régime perturbatif où la figure de diffraction contient seulement de faibles ordres non

[3] A. LANDRAGIN, G. HORVATH, L. COGNET, communication privée (1996).

spéculaires, ou encore la limite semi-classique où la longueur d'onde des atomes est beaucoup plus petite que la profondeur de pénétration de l'onde évanescente. Dans la limite semi-classique, l'on peut s'attendre à ce que la figure de diffraction s'approche de la distribution des vitesses pour des particules classiques ; nous pouvons alors comparer la théorie quantique à une approche purement classique où les atomes sont décrits par des points matériels. Nous verrons que la diffraction d'atomes lents par une onde évanescente stationnaire permet de mettre en évidence des phénomènes divers liés à des régimes physiques complémentaires.

Rappelons tout d'abord que l'apparition même des ordres de diffraction pour un atome réfléchi par l'onde évanescente stationnaire démontre que l'atome est une onde de matière de DE BROGLIE. En effet, les angles de diffraction discrets ne peuvent être interprétés qu'en invoquant des interférences constructives et destructives entre les ondes atomiques «secondaires» rayonnées par les différentes périodes du réseau. Par rapport à la réflexion sur une onde évanescente simple, où nous avons vu que le régime quantique correspond à une vitesse incidente des atomes en-dessous de la vitesse de recul, la diffraction présente l'avantage expérimental que l'on peut la réaliser avec des vitesses incidentes beaucoup plus élevées ; il est seulement nécessaire que la collimation du faisceau atomique dans la direction transverse soit meilleure que la vitesse de recul, pour que l'on puisse résoudre les ordres de diffraction.

Une autre propriété importante de la diffraction est qu l'onde atomique diffractée se trouve dans une superposition d'états externes qui ont des vitesses différentes. L'onde évanescente stationnaire réalise alors une séparatrice cohérente pour l'onde atomique, elle constitue ainsi un élément-clé pour l'interférométrie atomique.

Finalement, nous voudrions attirer l'attention sur une différence significative entre les réseaux en réflexion de l'optique lumineuse, d'une part, et le réseau de diffraction à atomes que réalise l'onde évanescente stationnaire, d'autre part : généralement, l'onde évanescente varie lentement à l'échelle de la longueur d'onde des atomes incidents. Par conséquent, nous ne pouvons trouver les populations des ordres de diffraction de la même façon que dans la théorie de la diffraction de la lumière, en imposant, à la surface du réseau, des conditions aux limites appropriées. La diffraction d'un atome par une onde lumineuse stationnaire ressemble plutôt à la diffraction de la lumière par une onde acoustique[4], et les descriptions théoriques de ces deux phénomènes contiennent en effet de nombreux analogies. Cette analogie se limite cependant à une géométrie de transmission, alors que dans l'onde évanescente stationnaire, la trajectoire de l'atome est renversée et sa vitesse s'annule au point de rebroussement. Le fait que la longueur d'onde atomique devient alors infinie, d'un point de vue semi-classique, complique apparemment la théorie de la diffraction d'atomes en réflexion. Or, nous avons constaté que les fonctions d'onde atomiques exactes qui décrivent la réflexion par une onde évanescente simple ne contiennent pas de singularité au point de rebroussement classique. Nous pouvons donc nous en servir comme point de départ pour calculer la figure de diffraction de façon perturbative. Cette approche correspond à l'approximation de

[4] M. BORN et E. WOLF, *Principles of Optics* (Pergamon Press, 6e édition), chap. XII.

BORN de la théorie de la diffusion quantique.

L'organisation de la partie II

Chap. 5. Nous présentons d'abord le **réseau de diffraction** réalisé par le potentiel dipolaire de l'onde évanescente stationnaire.

Chap. 6. Ensuite est étudié le **mouvement classique** d'un atome ponctuel dans ce potentiel. Nous calculons la distribution classique des vitesses des atomes réfléchis, et nous interprétons sa forme et sa largeur, ainsi que sa variation avec l'angle d'incidence.

Chap. 7. La théorie cinématique de la diffraction est présentée : nous calculons les angles de diffraction et proposons une approche perturbative à l'aide de l'**approximation de** BORN. Nous étudions l'efficacité de la diffraction dans les régimes semi-classique et quantique.

Chap. 8. Nous développons une méthode d'approximation pour le régime semi-classique, l'**approximation du réseau de phase mince** qui permet de caractériser la figure de diffraction au-delà de la limite perturbative, à condition que les atomes ne soient pas incidents en incidence rasante, et que la profondeur de pénétration de l'onde évanescente stationnaire soit comparable à sa période. Dans l'approximation du réseau de phase mince, la figure de diffraction se rapproche de la distribution classique des vitesses lorsque un grand nombre d'ordres de diffraction est peuplés. Nous comparons cette approximation à celle de RAMAN–NATH qui est utilisée pour un réseau en transmission.

En annexe au chapitre 8, nous reproduisons l'article « *Atomic diffraction by a thin phase grating* » par C. H., J.-Y. COURTOIS et A. ASPECT, paru dans le numéro spécial « Optique et interférométrie atomique » du *Journal de Physique II (France)* **4**, pp. 1955–74 (novembre 1994).

Chap. 9. Nous montrons qu'une onde évanescente avec une grande longueur de décroissance permet de réaliser un réseau de diffraction épais. Il apparaissent alors des **résonances de** BRAGG où seulement deux ordres de diffraction sont couplés entre eux de façon résonnante. Nous mettrons en évidence qu'au-delà de la limite perturbative, les populations des ordres résonnants sont décrites par un basculement périodique, un phénomène connu sous le nom de la *Pendellösung* dans la diffraction des rayons X ou des neutrons par un réseau épais.

Chap. 10. Dans le **régime quantique**, le réseau de diffraction peut être modélisé par une barrière de potentiel infinie. Nous empruntons à l'optique lumineuse l'approximation de RAYLEIGH qui permet de calculer, dans le cadre de ce modèle, la figure de diffraction au-delà de l'approximation de BORN.

Chap. 11. Nous montrons qu'une théorie de diffraction avec un atome à un niveau est insuffisante pour expliquer la **diffraction en incidence rasante**. Nous dépassons alors le cadre de la théorie scalaire et présentons deux approches alternatives : la théorie de R. DEUTSCHMANN et ses collègues qui fait intervenir l'état excité [78], et la diffraction d'un atome avec une structure magnétique dans l'état fondamental [81, 79]. Nous comparons ces approches à la théorie scalaire, ainsi qu'aux expériences de diffraction en incidence rasante.

Chap. 12. Nous reproduisons notre proposition théorique pour une onde évanescente avec une **modulation temporelle**, qui permet diffracter une onde atomique dans le temps : «*A modulated mirror for atomic interferometry*» par C. H., A. M. STEANE, R. KAISER et J. DALIBARD, qui a également été publié dans le numéro spécial «Optique et interférométrie atomique» du *Journal de Physique II (France)* **4**, pp. 1877–96 (novembre 1994).

Remarque : Note pour la lecture. Le chapitre 7 représente la pierre angulaire de cette partie : c'est la théorie des perturbations dans l'approximation de BORN qui nous permet d'identifier des situations physiques différentes. Les chapitres suivants 8 à 10 sont indépendants les uns des autres, mais ils s'appuient sur les résultats perturbatifs pour développer des approches théoriques appropriées aux différentes situations physiques. Le chapitre 6 éclaire les résultats de l'approximation de BORN d'un point de vue classique ; il précise également le régime d'un réseau «mince» auquel est limité l'approximation du réseau de phase mince du chapitre 8. Les chapitres 11 et 12, également indépendants, vont au-delà de la théorie de diffraction par un potentiel scalaire et indépendant du temps ; ils servent à préciser le lien aux autres réalisations expérimentales de la diffraction par le miroir à onde évanescente.

Les chapitres les plus proches des expériences actuelles sont les chapitres 8 et 11, ils se complètent mutuellement pour les deux cas limites de l'incidence quasi-normale et rasante.

Chapitre 5

Le réseau de diffraction

Le réseau de diffraction à atomes que nous étudions dans cette partie est créé par le champ lumineux d'une onde évanescente stationnaire. Dans le régime de faible saturation, et en négligeant l'émission spontanée, la diffraction d'atomes devient un problème hamiltonien où le mouvement de l'atome est déterminé par le potentiel dipolaire. Ce potentiel est donné par le déplacement lumineux de l'état fondamental atomique, il est proportionnel au module carré du champ électrique lumineux.

Dans ce chapitre, nous présentons le champ lumineux de l'onde évanescente stationnaire et nous en étudions les échelles spatiales caractéristiques. Ensuite, nous donnons le potentiel dipolaire correspondant et nous rappelons les conditions dans lesquelles ce potentiel permet de décrire la diffraction d'atomes.

5.1 L'onde évanescente stationnaire

Considérons deux ondes lumineuses planes qui subissent une réflexion totale interne sur l'interface entre le vide et un milieu diélectrique et qui se propagent en sens opposé parallèle à l'interface. La géométrie est esquissée sur la figure 5.1. Dans le vide au-dessus de l'interface, deux ondes évanescentes interfèrent et créent une onde évanescente stationnaire. Nous nous limiterons aux cas où les deux ondes lumineuses ont la même fréquence et sont incidentes sous un même angle par rapport à la normale de l'interface. Dans l'approximation scalaire, l'amplitude complexe du champ électrique est donnée par

$$E(\mathbf{r}) = \left[E_+ \,\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx} + E_- \,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx}\right] \mathrm{e}^{-\kappa z}. \tag{5.1}$$

Les quantités q et $\mathrm{i}\kappa$ sont les composantes du vecteur d'onde lumineux parallèle et perpendiculaire à l'interface. Nous avons choisi un système des coordonnées tel que le plan xOz se confond avec le plan d'incidence des deux ondes lumineuses. Les modules carrés des amplitudes électriques $E_\pm$ sont proportionnelles aux intensités des ondes lumineuses incidentes.

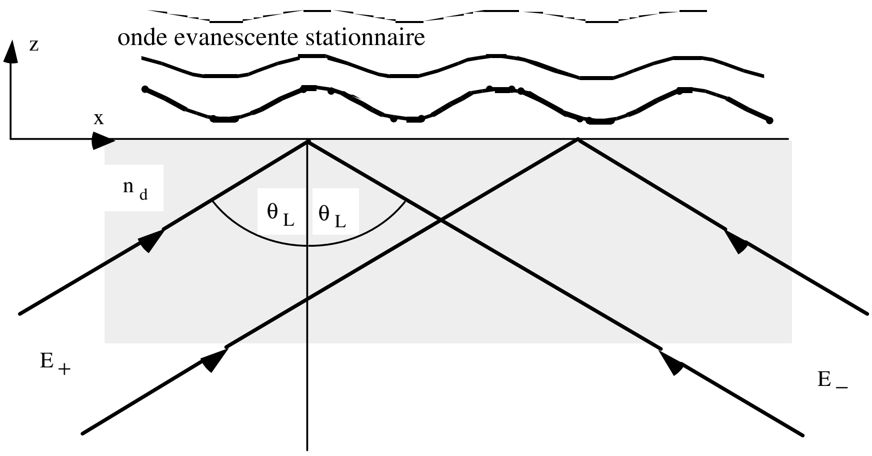

Figure 5.1: Dispositif expérimental schématique pour créer une onde évanescente stationnaire.

Le champ électrique (5.1) de l'onde évanescente stationnaire est invariant par translation dans la direction Oy. Ceci implique qu'un atome qui interagit avec lui demeure en mouvement rectiligne et uniforme dans cette direction. Nous pouvons donc nous limiter au plan xOz pour décrire son mouvement. Par analogie avec le schéma expérimental de la figure 5.1, nous appelerons Oz la direction «verticale», et Ox la direction «horizontale».

Echelles spatiales caractéristiques

Les deux ondes lumineuses ont un vecteur d'onde dont la composante horizontale est donnée par

$$q = k_L \, n_d \sin\theta_L. \tag{5.2}$$

Dans cette expression, k_L est le module du vecteur d'onde optique dans le vide, n_d est l'indice de réfraction du diélectrique et θ_L est l'angle d'incidence des ondes lumineuses, mesuré par rapport à l'axe vertical. Le vecteur d'onde q définit la période a de l'intensité de l'onde évanescente stationnaire :

$$a \equiv \frac{\pi}{q} = \frac{\lambda_L}{2n_d \sin\theta_L} \tag{5.3}$$

où $\lambda_L \equiv 2\pi/k_L$ est la longueur d'onde lumineuse dans le vide. Nous notons que la période du réseau est inférieure à la moitié de la longueur d'onde optique, $\lambda_L/2$.

Dans la direction verticale, le champ électrique (5.1) a une «épaisseur» $1/\kappa$ donnée par la profondeur de pénétration des ondes évanescentes. La constante de décroissance κ vaut

$$\kappa = k_L \sqrt{n_d^2 \sin^2\theta_L - 1}. \tag{5.4}$$

Si les ondes lumineuses sont incidentes au voisinage de l'angle limite ($n_d \sin\theta_L \to 1$), κ tend vers zéro et l'épaisseur de l'onde évanescente devient grande. A l'exception de

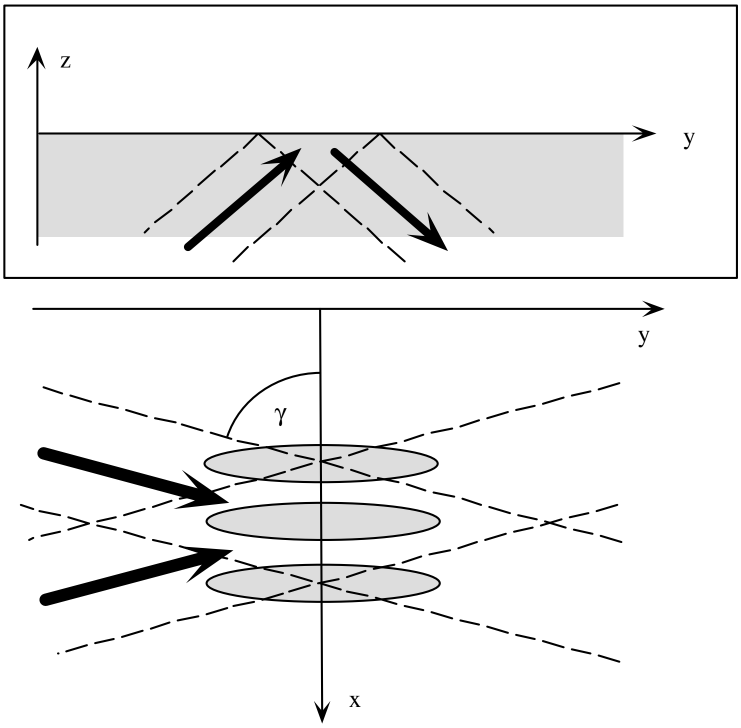

Figure 5.2: Schéma expérimental pour une onde évanescente stationnaire avec une longue période.

cas particuliers, nous allons considérer que l'épaisseur de l'onde évanescente est de l'ordre de la longueur d'onde optique réduite $\lambda_L/2\pi$.

> **Remarque.** On peut créer une onde évanescente stationnaire dont la période a est plus longue que λ_L si les deux ondes lumineuses qui la composent ne se propagent pas en sens opposé, mais que leurs plans d'incidence s'écartent d'un angle γ du plan xOz, comme le représente la figure 5.2. Le vecteur d'onde q, qui est la projection du vecteur d'onde lumineux sur l'axe Ox, est alors plus petit parce qu'il contient un facteur supplémentaire $\cos\gamma$ par rapport à (5.2). Si les deux ondes lumineuses sont presque co-propageantes ($\gamma \to 90°$), q tend vers zéro et on obtient une onde stationnaire avec une période très longue.

5.2 Le potentiel dipolaire

Rappelons que dans le régime de faible saturation, le potentiel dipolaire est proportionnel au module carré du champ électrique et qu'il repousse des atomes de l'interface pour un désaccord à résonance positif [voir (1.16)]. Pour l'onde évanescente stationnaire (5.1), il prend la forme d'une barrière de potentiel exponentielle dont la hauteur est spatialement modulée :

$$V(\mathbf{r}) = V_{\max}\left(1 + \epsilon\cos 2qx\right)\,\mathrm{e}^{-2\kappa z} \tag{5.5}$$

La valeur moyenne du potentiel à l'interface ($z = 0$) égale

$$V_{\max} = \frac{d^2}{\hbar\Delta}\left(\left|E_+\right|^2 + \left|E_-\right|^2\right), \tag{5.6}$$

et le contraste ϵ de la modulation du potentiel vaut

$$\epsilon = \frac{2\left|E_+E_-\right|}{\left|E_+\right|^2 + \left|E_-\right|^2}. \tag{5.7}$$

Notons que le contraste est indépendant de la distance z à l'interface, et inférieur ou égal à l'unité.

Le potentiel dipolaire (5.5) est représenté sur la figure 5.3. Ses échelles spatiales caractéristiques sont la longueur de décroissance $1/\kappa$ et la période a de l'onde évanescente stationnaire que nous avons étudiées au paragraphe précédent. La barrière de potentiel présente des « vallées » aux nœuds de l'onde évanescente stationnaire $x = (p + 1/2)\,a$ avec p un entier, qui sont séparées par des « crêtes » situées aux ventres $x = p\,a$. Un atome avec une énergie incidente supérieure à $(1 - \epsilon)\,V_{\max}$ peut atteindre la surface $z = 0$ du diélectrique au fond des vallées du potentiel. Si nous supposons que l'atome est alors perdu, cette énergie représente la hauteur de la barrière de potentiel. Il est commode de l'exprimer par la vitesse $v_{\max}$

$$\tfrac{1}{2}Mv_{\max}^2 \equiv (1 - \epsilon)\,V_{\max}. \tag{5.8}$$

Cette vitesse $v_{\max}$ est non nulle pour un contraste ϵ strictement inférieur à l'unité. Nous allons exclure le cas $\epsilon = 1$ dans la suite.

5.2.1 La condition de réflexion pour le réseau

Considérons un atome incident sur la barrière de potentiel (5.5) avec une vitesse incidente $\mathbf{v}_i$. Comme sa composante de vitesse dans la direction Oy est conservée, une condition suffisante pour qu'il soit réfléchi par le potentiel est que son énergie cinétique incidente dans le plan xOz soit inférieure à la hauteur de la barrière. En utilisant la vitesse maximale $v_{\max}$, cette condition s'écrit

$$v_{xi}^2 + v_{zi}^2 \leq v_{\max}^2. \tag{5.9}$$

Cette condition est une limite pessimiste. Elle assure que l'atome est réfléchi quels que soient sa position d'impact et son angle d'incidence. La réflexion est néanmoins possible pour des vitesses incidentes plus grandes dans des situations particulières : par exemple, si l'atome arrive en incidence normale sur une crête du potentiel, ou

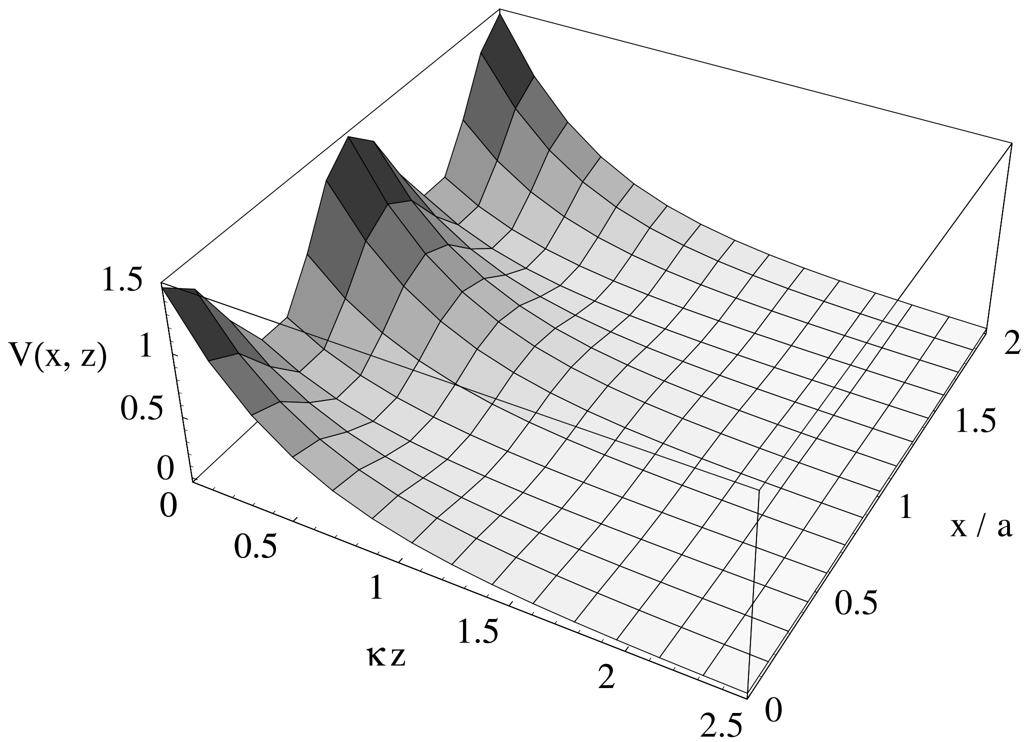

Figure 5.3: Le potentiel dipolaire de l'onde évanescente stationnaire (en unités de $V_{\max}$). Le contraste vaut $\epsilon = 0.5$.

encore en incidence oblique, si la composante horizontale de la vitesse reste non nulle pendant la réflexion. La condition de réflexion devient alors égale à celle du miroir à onde évanescente :

$$v_{zi} \leq v_{\max}. \tag{5.10}$$

Remarque. Un potentiel semblable au potentiel dipolaire de l'onde évanescente stationnaire (5.5),

$$V_{\mathrm{A}}(\mathbf{r}) = V_{\max} \exp(-2\kappa z + \epsilon \cos 2qx)\,, \tag{5.11}$$

a été étudié par G. ARMAND pour décrire la diffraction d'un atome par une surface cristalline [103, 104]. La période π/q du potentiel correspond alors à la maille élémentaire du cristal, et la longueur $1/\kappa$ modélise une profondeur de pénétration non nulle de l'atome dans le cristal. Dans la limite $1/\kappa \to 0$, l'on retrouve une barrière de potentiel infinie située sur la surface du cristal, $z = (\epsilon/2\kappa)\cos 2qx$. D'autre part, à la limite d'un contraste ϵ faible, les potentiels (5.5) et (5.11) deviennent identiques.

5.2.2 Conditions de validité

Rappelons que la description de l'interaction entre l'atome et le champ lumineux en termes du potentiel dipolaire est justifiée si la saturation de la transition atomique est faible et si le temps d'interaction est suffisamment court pour que la probabilité d'émission spontanée soit négligeable. En outre, nous nous limitons au seul potentiel dipolaire de l'onde évanescente et nous négligeons l'interaction attractive de VAN DER WAALS, en supposant que l'atome rebrousse chemin suffisamment loin du sommet de la barrière de potentiel. Ces conditions impliquent les mêmes contraintes pour la diffraction que pour la réflexion d'atomes, et nous renvoyons au paragraphe 2.2.2 du chapitre 2 pour une étude plus quantitative.

En revanche, nous devons ré-examer encore deux conditions qui ajoutent de nouvelles contraintes parce que le mouvement atomique dans direction horizontale Ox intervient explicitement dans la théorie. Nous supposons en effet

- que le déplacement DOPPLER est négligeable par rapport au désaccord de la fréquence lumineuse et

- que l'atome suit adiabatiquement le niveau habillé qui rejoint l'état fondamental en absence du champ lumineux.

En incidence au voisinage de la normale, le mouvement de l'atome dans la direction horizontale est lent par définition de sorte que le deplacement DOPPLER est faible et que l'état de l'atome peut suivre adiabatiquement le niveau de l'état fondamental. Les contraintes suivantes sont donc pertinentes surtout pour la diffraction en incidence oblique.

Le déplacement DOPPLER**.** Lorsque l'atome est en mouvement à la vitesse v_x dans la direction horizontale, il voit, dans son référentiel propre, les fréquences lumineuses des deux composantes progressives de l'onde évanescente déplacées à cause de l'effet DOPPLER. Les décalages en fréquence valent $\pm\Delta_D$ où $\Delta_D = qv_x$ est le déplacement DOPPLER et v_x la composante horizontale de la vitesse atomique. Pour une onde évanescente simple, nous avons pu incorporer ce changement de fréquence dans la définition du désaccord Δ, en nous plaçant dans le référentiel propre de l'atome. Si nous faisions cette transformation pour l'onde évanescente stationnaire, elle créerait une différence de fréquence $2\Delta_D$ entre les deux ondes lumineuses et le potentiel dipolaire deviendrait donc dépendant du temps. Nous évitons cette dépendance en restant dans le référentiel du laboratoire dans lequel les deux ondes évanescentes ont la même fréquence. Cependant, au sens strict, le potentiel dipolaire dépend alors de la vitesse horizontale v_x à travers le désaccord. Nous négligeons cette dépendance en nous plaçant dans le régime où le désaccord est beaucoup plus grand que le décalage DOPPLER :

$$\Delta \gg \Delta_D. \tag{5.12}$$

Les décalages DOPPLER pour la vitesse incidente v_{xi} et pour les vitesses des ordres de diffraction ne diffèrent que par une fréquence de l'ordre de la fréquence de recul, $\hbar k_L^2/2M$, et cette différence est généralement faible devant le désaccord Δ. Le décalage DOPPLER pertinent dans (5.12) est donc celui pour la vitesse incidente v_{xi}. Comme il s'annule en incidence normale, c'est en incidence rasante que le régime (5.12) peut être remis en question. Nous présenterons au chapitre 11 une approche alternative à la diffraction qui ne repose pas sur un potentiel dipolaire scalaire et qui est valable même quand le décalage DOPPLER est comparable au désaccord.

Le suivi adiabatique. Le mouvement de l'atome dans la direction Ox crée un «couplage non adiabatique» [78] entre les états habillés associés aux états fondamental et excité parce que ceux-ci présentent des variation spatiales. Nous avons vu au chapitre 1.1, à l'équation (1.23), que la fréquence caractéristique $\Omega_{\text{n.ad.}}$ pour ce couplage est de l'ordre

$$\Omega_{\text{NA}} \sim qv_x \frac{|dE(\mathbf{r})|}{\hbar\Delta} \tag{5.13}$$

La estimation (1.24) pour la probabilité de suivi adiabatique donne alors la condition suivante

$$qv_x \frac{|dE(\mathbf{r})|}{\hbar\Delta} \ll \Delta \tag{5.14}$$

pour la composante horizontale de la vitesse atomique. Nous constatons que ce critère est satisfait, compte tenu du régime de faible saturation (1.12), dès que nous nous sommes placé dans le régime d'un décalage DOPPLER Δ_D faible devant le désaccord Δ [la condition (5.12)].

Chapitre 6

Le mouvement classique

Nous étudions ici le mouvement classique d'un atome dans le potentiel dipolaire de l'onde évanescente stationnaire. Nous considérons d'abord une onde stationnaire avec un contraste faible et calculons de façon analytique et perturbative le transfert de vitesse dans la direction horizontale, parallèle au pas du réseau. Nous constatons que le transfert de vitesse diminue quand l'angle d'incidence des atomes s'écarte de l'incidence normale, et nous donnons une interprétation physique de cette diminution. Le résultat analytique est ensuite comparé à une solution numérique des équations classiques du mouvement. La comparaison nous permet d'établir un critère quantitatif pour la validité de l'approche perturbative.

6.1 Calcul analytique perturbatif

6.1.1 Les équations du mouvement

On déduit du potentiel dipolaire de l'onde évanescente stationnaire (5.5) les équations du mouvement suivantes[1]

$$\ddot{x}(t) = \epsilon \frac{2qV_{\max}}{M} \sin 2qx(t)\, \mathrm{e}^{-2\kappa\, z(t)} \tag{6.1a}$$

$$\ddot{z}(t) = \frac{2\kappa V_{\max}}{M} \left[1 + \epsilon \cos 2qx(t)\right] \mathrm{e}^{-2\kappa\, z(t)} \tag{6.1b}$$

Bien avant d'interagir avec l'onde évanescente, l'atome se trouve dans la région asymptotique où le potentiel s'annule. Il y est donc en mouvement rectiligne et uniforme à la vitesse incidente $(v_{xi}, -v_{zi})$. Les conditions initiales pour les équations du mouvement sont alors

$$t \to -\infty \; : \quad \left\{ \begin{array}{rcl} \dot{x}(t) & = & v_{xi}, \\ \dot{z}(t) & = & -v_{zi}. \end{array} \right. \tag{6.2}$$

[1] Comme l'atome est en mouvement avec une vitesse constante dans la direction Oy, nous omettons cette coordonnée.

Longtemps après l'interaction, l'atome se trouve de nouveau dans la région asymptotique avec une vitesse finale (v_{xf}, v_{zf}). A cause de la conservation d'énergie, nous avons

$$v_{xf}^2 + v_{zf}^2 = v_{xi}^2 + v_{zi}^2. \tag{6.3}$$

Nous introduisons le transfert de vitesse horizontal

$$\Delta v_x \equiv v_{xf} - v_{xi} \tag{6.4}$$

qui est la différence entre les composantes de vitesse horizontales après et avant l'interaction.

6.1.2 Solution perturbative

Il semble difficile de donner une solution analytique aux équations du mouvement (6.1). Nous avons donc recours à un calcul approché, en résolvant les équations du mouvement pour un faible contraste ϵ de l'onde évanescente stationnaire. Si le contraste vaut strictement zéro, la trajectoire de l'atome est celle que nous avons étudiée pour le miroir à onde évanescente, dans la partie précédente. Nous calculons ensuite le transfert de vitesse horizontal, au premier ordre par rapport au contraste de l'onde évanescente.

Rappelons la trajectoire non perturbée pour le potentiel de l'onde évanescente non modulée (**Pha** 2)

$$\begin{aligned} x^{(0)}(t) &= x_{\text{reb}} + v_{xi} t && \text{(6.5a)} \\ z^{(0)}(t) &= z_{\text{reb}} + \kappa^{-1} \ln \cosh(\kappa v_{zi} t) && \text{(6.5b)} \end{aligned}$$

où z_{reb} est la distance entre l'interface et le point de rebroussement (**Pha** 3)

$$z_{\text{reb}} \equiv \frac{1}{2\kappa} \ln \frac{2V_{\max}}{M v_{zi}^2} \tag{6.6}$$

L'origine du temps est choisie telle que l'atome rebrousse chemin à l'instant $t = 0$; dans la direction Ox, il se trouve alors à la «position d'impact» x_{reb}. Par ailleurs, l'atome est en mouvement à vitesse constante dans la direction horizontale. La trajectoire (6.5) est représentée sur la figure 6.1 (avec $x_{\text{reb}}, z_{\text{reb}} = 0$).

Pour un contraste ϵ non nul, nous écrivons la composante horizontale de la trajectoire sous la forme

$$x(t) = x^{(0)}(t) + x^{(1)}(t) + \dots, \tag{6.7}$$

où la correction $x^{(1)}(t)$ est du premier ordre en ϵ. Nous insérons cette expression dans l'équation du mouvement (6.1a). En remplaçant, dans le membre droit de l'équation du mouvement, la trajectoire par son expression (6.5) à l'ordre zéro, on trouve

$$\ddot{x}^{(1)}(t) = \epsilon q \, v_{zi}^2 \frac{\sin 2q \,(x_{\text{reb}} + v_{xi} t)}{\cosh^2(t/\tau_{\text{int}})} \tag{6.8}$$

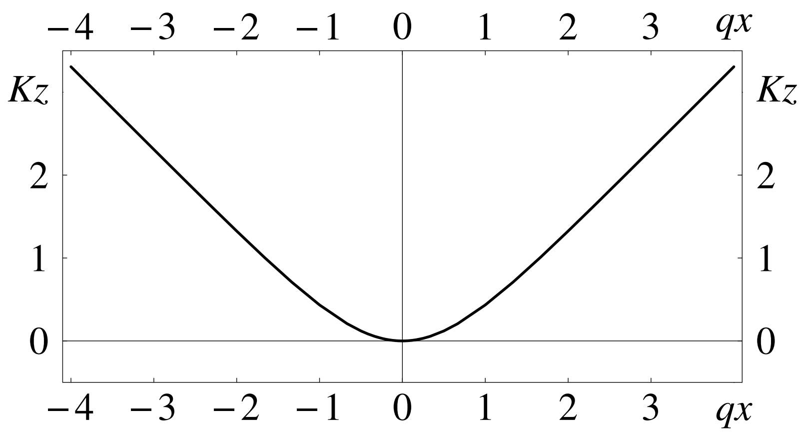

Figure 6.1: Trajectoire classique non perturbée (6.5).

où nous avons noté τ_{int} le temps d'interaction de l'atome avec l'onde évanescente. Comme pour la réflexion simple, τ_{int} est égal au temps nécessaire pour traverser la longueur de décroissance de l'onde évanescente à la vitesse incidente verticale

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{\kappa v_{zi}}. \tag{6.9}$$

L'équation (6.8) pour la correction $x^{(1)}(t)$ montre que la partie modulée du potentiel exerce une accélération sur l'atome pendant un temps de l'ordre du temps d'interaction τ_{int}. Au point de rebroussement, l'accélération vaut

$$\ddot{x}^{(1)}(t=0) = -\left.\frac{1}{M}\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{(x_{\text{reb}}, z_{\text{reb}})} = \epsilon\, q\, v_{zi}^2\, \sin 2qx_{\text{reb}}. \tag{6.10}$$

Cette quantité ne dépend pas de la hauteur de la barrière de potentiel $V_{\max}$ parce que, au point de rebroussement z_{reb}, la valeur du potentiel égale l'énergie cinétique incidente $Mv_{zi}^2/2$ (6.6).

Il est possible d'intégrer une fois de façon analytique l'accélération $\ddot{x}^{(1)}(t)$ (6.8), et de trouver la correction $v_x^{(1)}(t)$ de la vitesse horizontale en fonction du temps. Le calcul détaillé est présenté dans l'annexe 6.A. Nous ne donnons ici que le transfert de vitesse final, que l'on l'obtient à la limite des temps longs

$$\Delta v_x = v_x^{(1)}(t \to +\infty) = 2\epsilon\, \frac{q}{\kappa} v_{zi}\, \beta(\xi) \sin 2qx_{\text{reb}} \tag{6.11}$$

La fonction $\beta(\xi)$ dans cette expression est donnée par

$$\beta(\xi) = \frac{\pi\xi/2}{\sinh(\pi\xi/2)}, \tag{6.12}$$

son argument ξ est un paramètre sans dimension

$$\xi \equiv 2qv_{xi}\, \tau_{\text{int}} = 2\frac{q}{\kappa} \tan\theta_i, \tag{6.13}$$

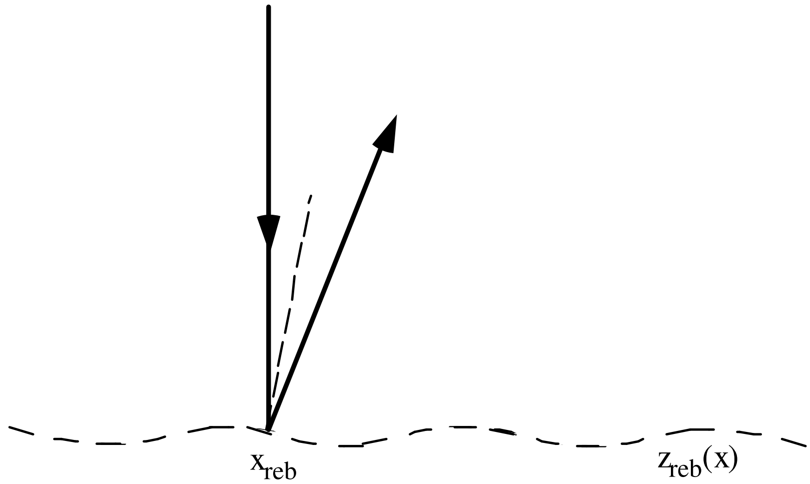

Figure 6.2: Réflexion localement spéculaire sur la surface de rebroussement (6.16).

qui dépend de l'angle d'incidence θ_i des atomes. Nous appelerons $\beta(\xi)$ le «facteur d'obliquité». En incidence près de la normale, il tend vers l'unité

$$\xi \ll 1 : \quad \beta(\xi) = 1 - \frac{\pi^2}{24}\xi^2 + \mathcal{O}\big(\xi^4\big)\,, \tag{6.14}$$

alors qu'en incidence oblique, il décroît exponentiellement vers zéro

$$\xi \gg 1 : \quad \beta(\xi) = \pi\xi \exp(-\pi\xi/2) + \mathcal{O}\left[\xi \exp(-3\pi\xi/2)\right]. \tag{6.15}$$

Dans le paragraphe suivant, nous interprétons le transfert de vitesse (6.11) dans les deux cas limite d'incidence normale et d'incidence oblique.

6.1.3 Interprétation du transfert de vitesse

Incidence normale

Pour interpréter le transfert de vitesse (6.11), introduisons la *surface de rebroussement* $z_{\rm reb}(x)$, où l'énergie potentielle égale l'énergie cinétique incidente. Cette surface est donnée par l'équation

$$z_{\rm reb}(x) = z^{(0)}_{\rm reb} + \frac{1}{2\kappa}\ln(1 + \epsilon \cos 2qx) \tag{6.16}$$

où $z^{(0)}_{\rm reb}$ est la distance du point de rebroussement pour un contraste nul (6.6). La surface de rebroussement est dessinée en pointillées sur la figure 6.2. A cause de la conservation de l'énergie, un atome peut pénétrer dans le réseau de diffraction seulement jusqu'à cette surface.

Imaginons-nous maintenant le potentiel dipolaire remplacé par une barrière de potentiel infinie qui se trouve sur la surface de rebroussement $z_{\rm reb}(x)$. Quand un atome

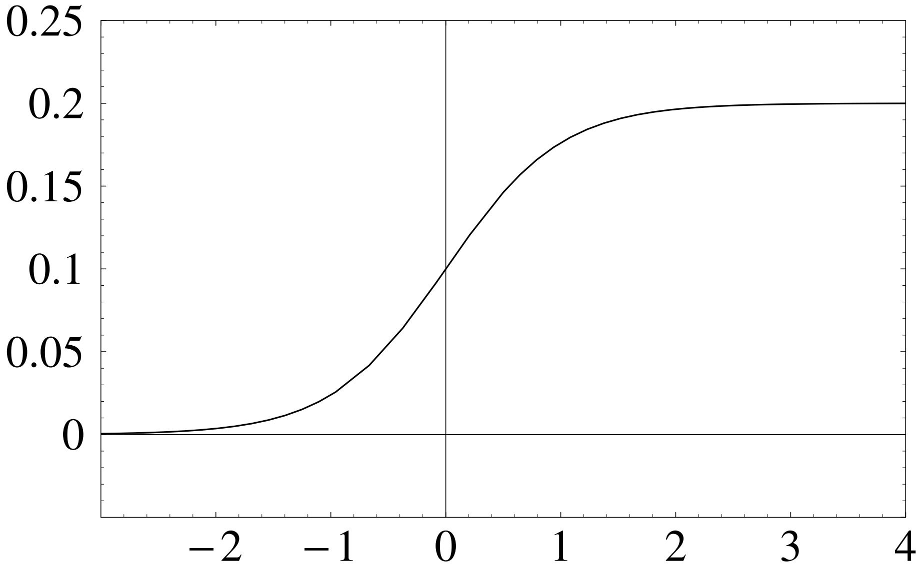

Figure 6.3: Composante horizontale de la vitesse atomique, au premier ordre par rapport au contraste. Nous avons pris la vitesse incidente v_{zi} comme unité de vitesse.

est réfléchi spéculairement par un telle barrière, à la position d'impact x_{reb}, il reçoit un transfert de vitesse horizontal parce que la surface est localement inclinée par rapport au plan horizontal (voir la figure 6.2). Pour un contraste ϵ faible, le vecteur normal à la surface (6.16) forme un angle $\epsilon\,(q/\kappa)\sin 2qx_{\mathrm{reb}}$ avec l'axe vertical. La trajectoire atomique réfléchie est déviée du double de cet angle, ce qui correspond à un transfert de vitesse horizontal égal à $\Delta v_x = 2\epsilon\,(q/\kappa)\,v_{zi}\sin 2qx_{\mathrm{reb}}$. Ce transfert est en accord avec (6.11), compte tenu du fait que $\beta(\xi)$ est égal à l'unité en incidence normale.

Cette interprétation suggère que la réflexion de l'atome a lieu de façon instantanée ce qui n'est pas tout à fait exact. En réalité, l'atome est déjà soumis à une force non nulle avant d'arriver à la surface de rebroussement. A titre d'illustration, nous avons tracé sur la figure 6.3 la vitesse horizontale au premier ordre que l'on obtient en intégrant l'équation (6.8) pour $v_{xi} = 0$, avec le résultat

$$v_x^{(1)}(t) = \frac{\Delta v_x}{1 + \exp(-t/\tau_{\mathrm{int}})}. \tag{6.17}$$

On voit sur la figure que la vitesse horizontale change de façon continue pendant l'interaction. Elle augmente pendant un temps de l'ordre du temps d'interaction τ_{int} et atteint sa valeur asymptotique Δv_x après quelques τ_{int}.

Néanmoins, si le changement de la vitesse horizontale n'introduit pas de déplacement important de l'atome à l'échelle de la période du réseau, la réflexion instantanée sur la surface de rebroussement reste un concept utile. Nous en donnerons au paragraphe 6.2 un critère de validité plus précis, lorsque nous comparerons les résultats de l'approche perturbative à un calcul numérique de trajectoires.

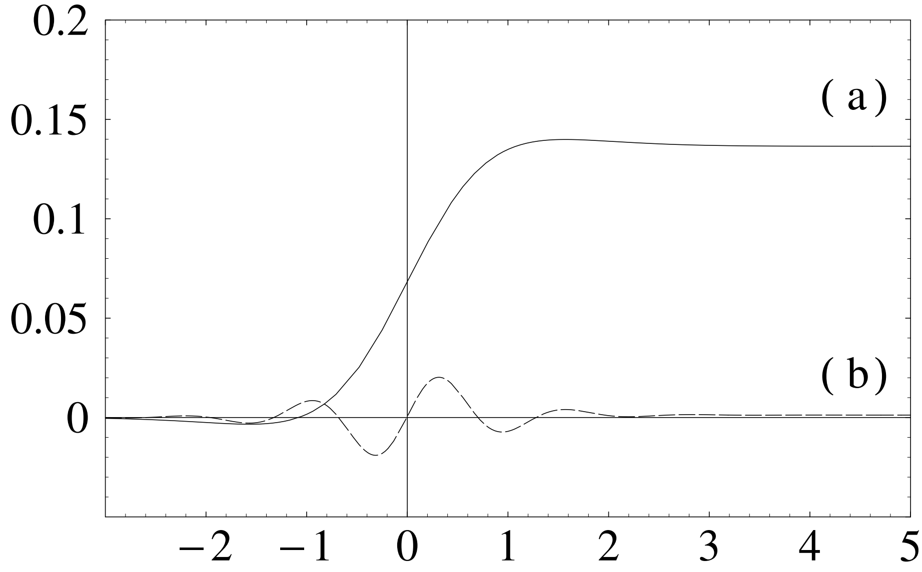

Figure 6.4: Correction de la vitesse horizontale en incidence oblique, en fonction du temps.
(a) Nombre de périodes traversées faible ($2qv_{xi}\tau_{\rm int} = 1$). (b) Nombre de périodes traversées élevé ($2qv_{xi}\tau_{\rm int} = 5$).

Incidence oblique

Le transfert de vitesse Δv_x (6.11) devient petit lorsque l'on s'éloigne de l'incidence normale, à cause de la décroissance (6.15) du facteur d'obliquité. Pour interpréter cette décroissance, notons qu'en incidence oblique ($v_{xi} \neq 0$), l'atome traverse plusieurs périodes du réseau pendant le temps d'interaction. La partie modulée du potentiel exerce donc une force oscillante sur l'atome (6.8), avec une fréquence d'oscillation donnée par $2qv_{xi}$. Le transfert de vitesse Δv_x correspond à la valeur moyenne de cette force sur un intervalle de temps de l'ordre du temps d'interaction $\tau_{\rm int}$ (voir l'équation 6.8). Si maintenant l'atome traverse un grand nombre de périodes du réseau pendant la réflexion, on s'attend à ce que le transfert de vitesse devienne petit, d'une part parce que la moyenne sur l'oscillation tend vers zéro et d'autre part parce que l'amplitude des oscillations de la force varie de façon continue.[2] Le transfert de vitesse Δv_x devient donc négligeable dans la limite :

$$2qv_{xi}\,\tau_{\rm int} = 2\frac{q}{\kappa}\tan\theta_i \gg 1. \tag{6.18}$$

C'est précisément ce phénomène qu'exprime le facteur d'obliquité $\beta(\xi)$ dont l'argument ξ (6.13) est d'ailleurs égal à (6.18).

[2]C'est à cause de l'enveloppe continue des oscillations de la force que dans la limite d'une grande fréquence d'oscillation, $2qv_{xi} \gg 1/\tau_{\rm int}$, le transfert de vitesse décroît plus vite qu'une loi de puissance, à la différence d'une enveloppe en créneau.

Sur la figure 6.4, nous montrons le changement de la vitesse horizontale au premier ordre en fonction du temps, pour deux valeurs différentes de la fréquence d'oscillation de la force. On constate que pour une oscillation rapide, la vitesse suit les oscillations de la force de façon "adiabatique" pendant l'interaction, si bien qu'aux temps longs, le transfert de vitesse s'annule en même temps que la force.

Remarque 1. Pour la composante de vitesse suivant la direction *verticale*, le calcul perturbatif devient plus complexe pour la raison suivante : l'équation pour la correction du premier ordre $z^{(1)}(t)$ contient une force de rappel

$$\ddot{z}^{(1)}(t) + \omega_z^2(t)\ z^{(1)}(t) = \epsilon \frac{q}{\kappa^2 \tau_{\rm int}^2} \frac{\cos 2q\,(x_{\rm reb} + v_{xi} t)}{\cosh^2(t/\tau_{\rm int})} \tag{6.19}$$

avec une fréquence d'oscillation $\omega_z(t)$ qui dépend du temps

$$\omega_z(t) = \frac{\sqrt{2}/\tau_{\rm int}}{\cosh(t/\tau_{\rm int})}. \tag{6.20}$$

Il est possible d'intégrer l'équation (6.19) de façon analytique, en utilisant la fonction de GREEN pour l'opérateur différentiel du membre gauche, mais nous n'allons pas entrer dans les détails. En effet, il suffit d'invoquer la conservation d'énergie (6.3) pour trouver le transfert de vitesse final Δv_z : au premier ordre par rapport au contraste, ceci donne

$$\Delta v_z \approx -\Delta v_x \frac{v_{xi}}{v_{zi}} = -2\epsilon\,\frac{q}{\kappa} v_{xi}\,\beta(\xi) \sin 2q x_{\rm reb}. \tag{6.21}$$

Remarque 2. Nous constatons que les rapports entre les transferts de vitesse $\Delta v_{x,z}$ (6.11, 6.21) et la vitesse verticale incidente v_{zi} ne dépendent plus que de l'angle d'incidence θ_i et des paramètres ϵ et q/κ caractérisant la forme géométrique du potentiel. Pour interpréter cette invariance, introduisons des unités naturelles dans les équations du mouvement (6.1) : choisissons comme unité de longueur la longueur de décroissance $1/\kappa$ de l'onde évanescente et comme unité de vitesse la vitesse incidente verticale v_{zi}. L'unité naturelle pour le temps est alors donnée par le temps d'interaction $\tau_{\rm int}$ (6.9). En utilisant ces unités, les équations du mouvement deviennent

$$\hat{v}'_x\big(\hat{t}\big) = \epsilon \frac{q}{\kappa} \sin\Big[2\frac{q}{\kappa}\,\hat{x}(\hat{t})\Big]\, {\rm e}^{-2\left(\hat{z}(\hat{t}) - \hat{z}_{\rm reb}\right)} \tag{6.22a}$$

$$\hat{v}'_z\big(\hat{t}\big) = \Big\{1 + \epsilon \cos\Big[2\frac{q}{\kappa}\,\hat{x}(\hat{t})\Big]\Big\}\, {\rm e}^{-2\left(\hat{z}(\hat{t}) - \hat{z}_{\rm reb}\right)} \tag{6.22b}$$

où les quantités avec l'accent circonflexe sont sans dimension (les primes $'$ dans (6.22) dénotent la dérivée par rapport à $\hat{t}$), et où $\hat{z}_{\rm reb}$ est la position du point de rebroussement (6.6). Si nous répérons maintenant la coordonnée $\hat{z}$ par rapport à $\hat{z}_{\rm reb}$, les seuls paramètres qui restent dans ces équations sont en effet le contraste du réseau ϵ et le rapport q/κ entre les échelles spatiales verticale et horizontale du réseau.

Les conditions initiales (6.2) deviennent, en utilisant les unités naturelles,

$$\hat{t} \to -\infty\ :\quad \left\{ \begin{array}{rcl} \hat{v}_x\big(\hat{t}\big) &=& \tan\theta_i, \\ \hat{v}_z\big(\hat{t}\big) &=& -1. \end{array} \right. \tag{6.23}$$

où n'intervient plus que l'angle d'incidence. Par conséquent, la forme géométrique des trajectoires est indépendante de la vitesse incidente de l'atome, seul le temps nécessaire pour parcourir les trajectoires en dépend.

6.1.4 La distribution classique de la vitesse finale

Considérons maintenant un ensemble classique d'atomes qui sont réfléchis par le réseau, et calculons leur distribution de vitesse après réflexion. Nous supposons que les atomes sont tous incidents à la même vitesse et sous le même angle et que leur distribution en position est uniforme sur une période du réseau avec une densité linéique ρ_i.

Dans le cadre de l'approche perturbative, la vitesse finale (6.11) dépend de la position d'impact $x_{\rm reb}$, c'est-à-dire de la position de l'atome à l'instant où, dans la direction verticale, il rebrousse chemin :

$$v_{xf}(x_{\rm reb}) = v_{xi} + \Delta v_x^{\rm max} \sin 2q x_{\rm reb} \tag{6.24}$$

Le transfert de vitesse maximal $\Delta v_x^{\rm max}$ dans cette expression vaut

$$\Delta v_x^{\rm max} = 2\epsilon\, (q/\kappa)\, v_{zi}\, \beta(\xi)\, . \tag{6.25}$$

Le résultat (6.24) permet de calculer la distribution de la vitesse finale par le raisonnement suivant : le nombre d'atomes qui rebroussent chemin à la position $x_{\rm reb}$, à $\mathrm{d}x_{\rm reb}$ près, est égal à $\rho_i\, \mathrm{d}x_{\rm reb}$. Par ailleurs, $\rho_i\, \mathrm{d}x_{\rm reb}$ est égal au nombre d'atomes qui ont une vitesse finale v_{xf}, à $\mathrm{d}v_{xf}$ près. La distribution des vitesses finales $\rho(v_{xf})$ est donc donnée par[3]

$$\rho(v_{xf}) = 2\rho_i \left| \frac{\partial x_{\rm reb}}{\partial v_{xf}} \right| = \frac{\rho_i}{q\, \Delta v_x^{\rm max}} \left[1 - \left(\frac{v_{xf} - v_{xi}}{\Delta v_x^{\rm max}} \right)^2 \right]^{-1/2} \tag{6.26}$$

Cette distribution est représentée sur la figure 6.5. Elle a une largeur caractérisée par le transfert de vitesse maximal et contient deux pics de même hauteur aux vitesses finales $v_{xi} \pm \Delta v_x^{\rm max}$.

Pour interpreter les pics de la distribution de vitesse, nous rappelons que la vitesse finale (6.24) passe par des valeurs extrêmes aux positions d'impact $x_{\rm reb} = \pm a/4$ où le gradient horizontal du potentiel est maximal (pour l'incidence normale, voir la figure 6.2). Tous les atomes qui interagissent avec le réseau dans une bande infinitésimale $\mathrm{d}x_{\rm reb}$ autour des ces positions d'impact, contribuent à la même vitesse finale, à une largeur $\mathrm{d}v_{xf}$ près qui est d'ordre quadratique en $\mathrm{d}x_{\rm reb}$. La distribution de

[3]Le facteur 2 dans l'équation (6.26) tient compte du fait que deux positions par période du réseau correspondent à la même vitesse finale. Elles se trouvent de façon symétrique de part et d'autre de la position où le gradient du potentiel est extrémum.

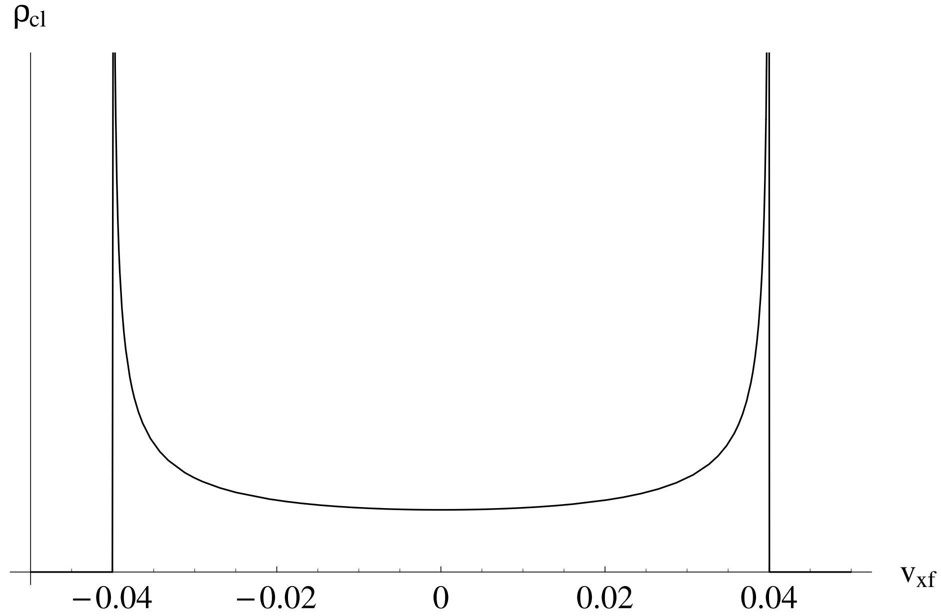

Figure 6.5: Distribution de vitesse classique de particules réfléchies par une onde évanescente stationnaire. Incidence normale. La vitesse v_{xf} est mesurée en unités de v_{zi}. Le transfert de vitesse maximal vaut $\Delta v_x^{\max} \approx 0.04\, v_{zi}$.

vitesse diverge donc aux valeurs extrêmes[4] de $v_{xf} = v_{xi} \pm \Delta v_x^{\max}$. Nous notons que l'intégrale de la distribution sur les pics divergents reste finie, puisque la distribution est normalisée.

Pour la diffraction d'atomes, nous allons constater (au paragraphe 8.4.6) que la distribution classique (6.26) donne l'enveloppe de la figure de diffraction, si toutefois l'approche perturbative que nous avons suivie pour calculer le transfert de vitesse, est valable.

6.2 Comparaison au calcul numérique

La solution numérique des équations classiques du mouvement permet d'étudier de façon quantitative jusqu'à quelle valeur du contraste l'approche perturbative reste valable. Quand le contraste de l'onde stationnaire augmente, la trajectoire de l'atome s'écarte de plus en plus de sa forme non perturbée. Nous caractérisons d'abord cette déviation en incidence normale, en comparant le temps d'interaction aux temps d'oscillation dans les modulations du potentiel. Nous identifions ainsi deux

[4]Un effet semblable est à l'origine de l'arc-en-ciel : un rayon lumineux réfracté par une goutte d'eau est dévié par un angle qui dépend du paramètre d'impact du rayon. Les valeurs extrêmes de la déviation angulaire du rayon correspondent aux angles où apparaissent les arcs-en-ciel. Voir aussi [105, 106] pour un tel effet dans la diffusion d'atomes par un surface cristalline.

régimes qui permettent d'interpréter les résultats numériques. Ensuite, nous étudions l'influence du contraste sur la déviation des trajectoires en incidence oblique.

6.2.1 Incidence normale

L'approche perturbative utilise la trajectoire non perturbée de l'atome qui est strictement verticale en incidence normale. Cependant, la vraie trajectoire s'écarte de l'axe vertical sous l'influence du gradient horizontal du potentiel. Nous nous attendons à ce que le calcul perturbatif soit une bonne approximation si le déplacement de l'atome dans la direction horizontale est petit à l'échelle de la période du réseau. Dans la limite opposée, la trajectoire de l'atome est modifiée de façon importante, et l'atome effectue alors un mouvement oscillatoire dans le potentiel.

Pour caractériser ces deux régimes, considérons un atome qui entre dans le potentiel au «fond d'une vallée», autour de la position $x = a/2$. En approximant le potentiel (5.5) au fond de la vallée par un potentiel harmonique, on trouve que la fréquence d'oscillation ω_x dans la direction horizontale est donnée par

$$\omega_x = 2q\sqrt{\frac{\epsilon\, V_{\max}}{M}}\mathrm{e}^{-\kappa z} \tag{6.27}$$

Dans la région asymptotique, le potentiel et par conséquent, la fréquence ω_x s'annulent. Quand l'atome entre dans le potentiel, ω_x augmente et atteint sa valeur maximale à la position $z = z_{\mathrm{reb}}(x = a/2)$ de la surface de rebroussement (6.16). La valeur maximale $\omega_x^{\max}$ de la fréquence d'oscillation vaut donc

$$\omega_x^{\max} = \frac{q}{\kappa\tau_{\mathrm{int}}}\sqrt{\frac{2\epsilon}{1-\epsilon}}. \tag{6.28}$$

Le déplacement de l'atome dans la direction horizontale est faible si le temps d'interaction τ_{int} est court, comparé à la période d'oscillation. Cette condition peut s'exprimer sous la forme

$$\omega_x^{\max}\tau_{\mathrm{int}} = \frac{q}{\kappa}\sqrt{\frac{2\epsilon}{1-\epsilon}} \ll 1, \tag{6.29}$$

où le paramètre $\omega_x^{\max}\tau_{\mathrm{int}}$ donne l'ordre de grandeur du nombre d'oscillations pendant le temps d'interaction. Nous appelons ce régime celui du *réseau géométriquement mince*. La situation est illustrée sur la figure 6.6.

Le régime opposé est celui d'un *réseau géométriquement épais*, cas dans lequel l'atome oscille plusieurs fois dans la vallée de potentiel pendant le temps d'interaction. Ce régime est caractérisé par la condition

$$\omega_x^{\max}\tau_{\mathrm{int}} = \frac{q}{\kappa}\sqrt{\frac{2\epsilon}{1-\epsilon}} \gtrsim 1. \tag{6.30}$$

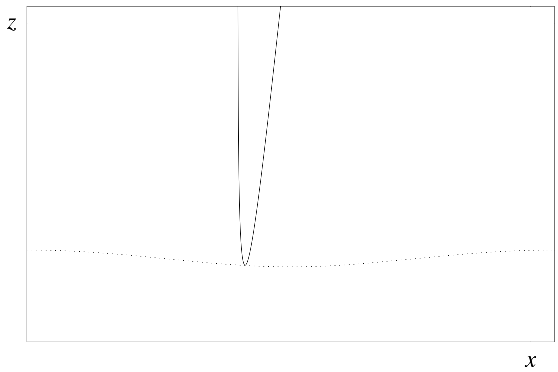

Figure 6.6: Trajectoire classique dans un réseau géométriquement mince.

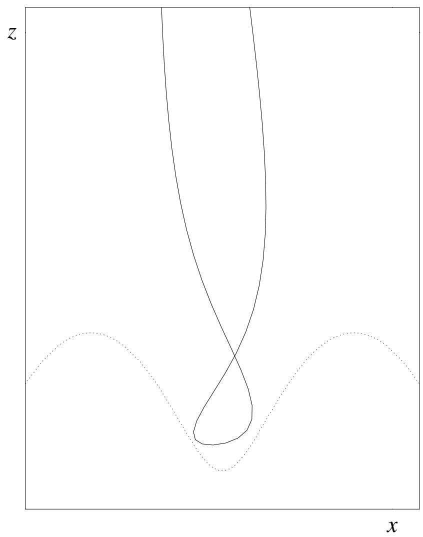

Figure 6.7: Trajectoire classique dans un réseau géométriquement épais.

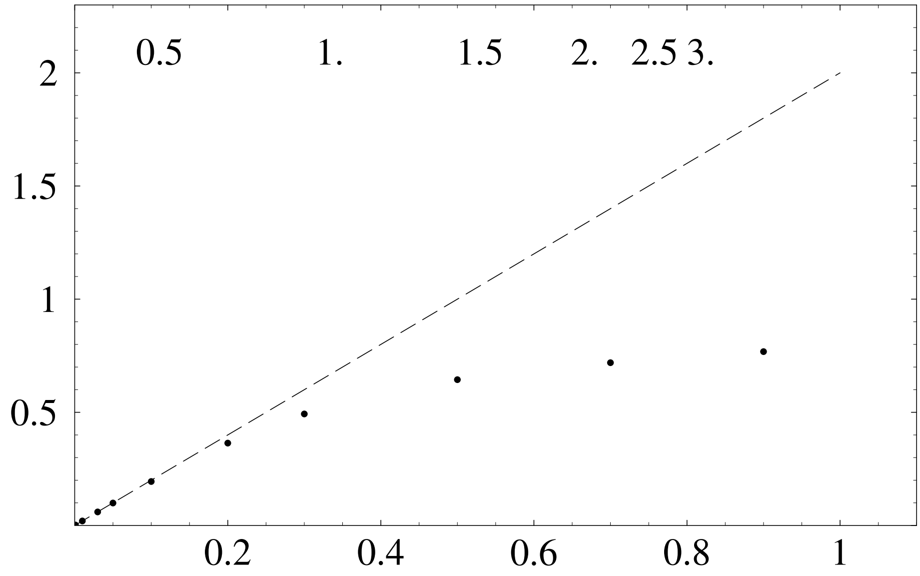

Figure 6.8: Transfert de vitesse horizontal maximal en incidence normale, en fonction du contraste. Points : résultats numériques. Tirets : prévision perturbative (6.31). L'unité de vitesse est la vitesse incidente v_{zi}. Les valeurs du paramètre $\omega_{\rm osc}^{\rm max}\tau_{\rm int}$ sont notées en haut de la figure. On a pris $q = \kappa$.

Nous illustrons cette situation sur la figure 6.7 par une trajectoire qui monte deux fois sur les «flancs» de la vallée.

Nous présentons maintenant les résultats d'un calcul numérique qui met en évidence la transition du régime du réseau géométriquement mince vers celui du réseau géométriquement épais. A cet effet, nous avons intégré les équations du mouvement (6.1) numériquement, pour un certain nombre de positions initiales dans une demi-période du réseau.[5] Une fois que l'atome est sorti du réseau après la réflexion, les vitesses horizontales v_{xf} permettent de calculer les valeurs maximales et minimales du transfert de vitesse horizontal, et donc la largeur de la distribution de vitesse classique.

Sur la figure 6.8, nous montrons le transfert de vitesse maximal $\Delta v_x^{\rm max}$, en fonction du contraste de l'onde stationnaire. La ligne en tirets correspond à la prévision perturbative (6.25) qui vaut, en incidence normale,

$$\Delta v_x^{\rm max} = 2\epsilon\,(q/\kappa)\,v_{zi}. \tag{6.31}$$

On voit sur la figure que le transfert de vitesse augmente linéairement avec le contraste ϵ, en accord avec (6.31), jusqu'à une valeur $\epsilon \approx 0.2$. Pour un contraste plus grand, $\Delta v_x^{\rm max}$ s'écarte de la prévision perturbative, et on entre dans le régime du réseau géométriquement épais. Cette transition a lieu quand le paramètre de la condition du

[5]En incidence normale, les trajectoires de l'autre demi-période sont obtenues en utilisant la symétrie de réflexion $x \mapsto -x$ du potentiel (5.5).

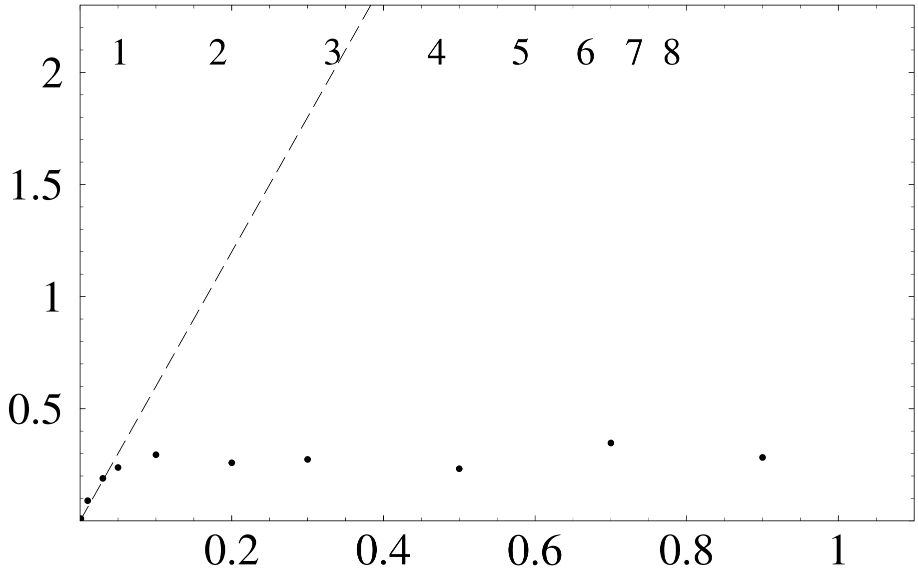

Figure 6.9: Transfert de vitesse horizontal maximal (voir la figure 6.8), pour un réseau plus épais ($q = 3\,\kappa$).

réseau géométriquement mince (6.29) vaut

$$\omega_x^{\max}\tau_{\text{int}} \approx 0.7 \tag{6.32}$$

Dans le régime du réseau géométriquement épais, le transfert de vitesse sature parce que l'atome oscille dans le potentiel autour du fond d'une vallée. Le transfert de vitesse est alors déterminée par l'ouverture angulaire de la vallée. Nous notons que cette ouverture est proportionnelle au rapport κ/q entre les échelles horizontale et verticale du potentiel.

A titre de comparaison, nous présentons sur la figure 6.9 le transfert de vitesse maximal pour un réseau plus épais (le paramètre q/κ est plus grand). En comparant à la figure 6.8, on constate que $\Delta v_x^{\max}$ augmente plus vite avec le contraste ϵ, en accord avec (6.31). La transition vers le régime du réseau géométriquement épais a lieu pour un contraste ϵ plus faible comme prévu par la condition (6.30). Nous constatons que dans les deux cas ($q = \kappa$ et $q = 3\kappa$), le nombre d'oscillations $\omega_x^{\max}\tau_{\text{int}}$ est à peu près le même (6.32) à la transition entre les deux régimes. Une fois le régime du réseau géométriquement épais atteint, le transfert de vitesse sature à un niveau plus bas, de l'ordre de $v_{zi}(\kappa/q)$, en accord avec l'idée qu'il est fixé par l'ouverture angulaire des vallées de potentiel.

Nous concluons de la comparaison au calcul numérique que l'approche perturbative est valable quand le réseau de diffraction est géométriquement mince [la condition (6.29)].

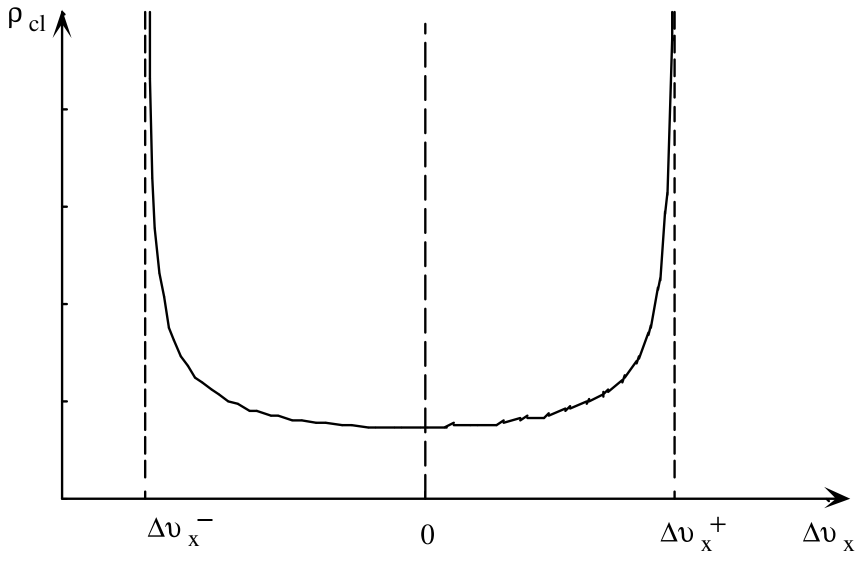

Figure 6.10: Exemple de distribution de vitesse finale $\rho_{\rm cl}(\Delta v_x)$.

6.2.2 Incidence oblique

Rappelons que le calcul perturbatif prédit une décroissance du transfert de vitesse lorsque l'on s'éloigne de l'incidence normale, parce que les oscillations de la force qui agit sur l'atome sont moyennées sur un temps de l'ordre du temps d'interaction. Le calcul numérique permet de vérifier si ce résultat reste valable, même si le contraste ϵ de l'onde stationnaire est plus élevé.

Nous avons à cet effet calculé, en fonction de la vitesse horizontale incidente v_{xi}, les transferts de vitesse $\Delta v_x^{\pm}(v_{xi})$ qui correspondent aux deux pics de la distribution de vitesse finale. La figure 6.10 présente un exemple d'une telle distribution. Rappelons que la distribution de vitesse (6.26) que nous avons obtenue dans l'approche perturbative, présente les valeurs suivantes pour les transferts de vitesse $\Delta v_x^{\pm}(v_{xi})$

$$\text{calcul perturbatif:} \qquad \Delta v_x^{\pm}(v_{xi}) = \pm\Delta v_x^{\rm max} = \pm 2\epsilon\,(q/\kappa)\,v_{zi}\,\beta\Big(\frac{2qv_{xi}}{\kappa v_{zi}}\Big) \tag{6.33}$$

où nous avons explicité la dépendance de v_{xi}. Le calcul perturbatif prédit donc que les deux pics de la distribution de vitesse finale sont symétriques par rapport au transfert de vitesse zéro, et que les transferts de vitesse (6.33) prennent leurs valeurs extrêmes $\pm 2\epsilon(q/\kappa)v_{zi}$ en incidence normale, donc pour une vitesse incidente $v_{xi}^{\rm ext}$ nulle :

$$\text{calcul perturbatif:} \qquad v_{xi}^{\rm ext} = 0. \tag{6.34}$$

Lorsque v_{xi} augmente, l'expression (6.33) pour les transferts $\Delta v_x^{\pm}(v_{xi})$ décroît, avec une échelle de vitesse caractéristique δv_{xi} qui est donnée par la largeur du facteur d'obliquité $\beta(2qv_{xi}/\kappa v_{zi})$:

$$\text{calcul perturbatif:} \qquad \delta v_{xi} \simeq (\kappa/q)v_{zi}. \tag{6.35}$$

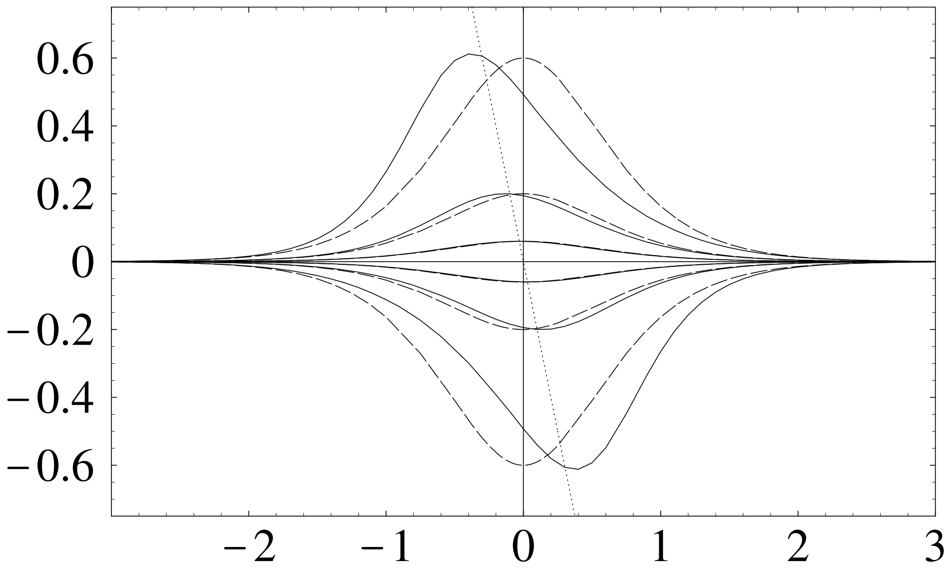

Figure 6.11: Transferts de vitesse pour les pics de la distribution de vitesse, en fonction de la vitesse incidente horizontale v_{xi}. Trait plein : résultats numériques, tirets : calcul analytique perturbatif. Les vitesses sont données en unités de la vitesse incidente normale v_{zi}. Les courbes correspondent aux contrastes $\epsilon = 0.03, 0.1, 0.3$ (en s'éloignant de l'axe horizontal). On a pris $q = \kappa$.

Nous comparons sur la figure 6.11 le résultat perturbatif (6.33) au résultat du calcul numérique. Les courbes correspondent à des différentes valeurs du contraste ϵ. On constate que les deux approches sont en bon accord pour un contraste faible (les courbes proches de l'axe horizontale). Par contre, pour un contraste plus élevé, les transferts de vitesse $\Delta v_x^\pm$ ne sont plus symétriques par rapport à $\Delta v_x = 0$. En outre, leurs extremums ne correspondent plus à l'incidence normale. Le maximum de $\Delta v_x^+(v_{xi})$ est plutôt atteint pour une vitesse incidente v_{xi} négative. Inversément, le mimimum de $\Delta v_x^-(v_{xi})$ se trouve à une vitesse v_{xi} positive.[6] En revanche, les valeurs des transferts $\Delta v_x^\pm$ aux extremums sont en accord avec l'extremum en incidence normale, $\pm 2\epsilon(q/\kappa)v_{zi}$, de la prediction perturbative (6.33).

Pour interpréter ce comportement, nous allons étudier les trajectoires tracées sur les figures 6.12 et 6.13. Leurs positions d'impact se trouvent là où le gradient horizontal du potentiel est le plus grand. Rappelons que ce sont ces trajectoires qui correspondent aux pics de la distribution de vitesse finale. Sur les figures, la courbe en pointillées représente la surface de rebroussement[7] $z_{\rm reb}(x)$.

Considérons d'abord les trajectoires «*N*» de la figure 6.12 qui sont incidentes en incidence normale. On constate qu'elles n'atteignent pas exactement la surface de rebroussement. La raison en est qu'elles sont déjà soumises au gradient du potentiel

[6]Notons que ceci est une conséquence de la symétrie $x \mapsto -x$ du potentiel.

[7]En incidence oblique, il faut inclure la composante de vitesse horizontale v_{xi} dans l'énergie cinétique incidente pour calculer la surface de rebroussement $z_{\rm reb}(x)$ (6.16).

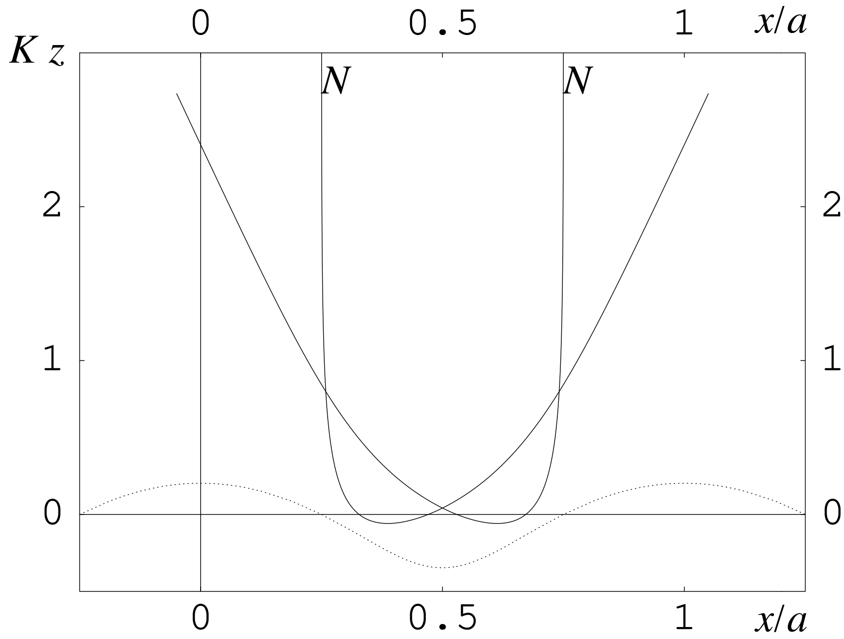

Figure 6.12: Trajectoires classiques pour le transfert de vitesse maximal. Incidence normale. Pointillées : surface de rebroussement. Contraste $\epsilon = 0.5$.

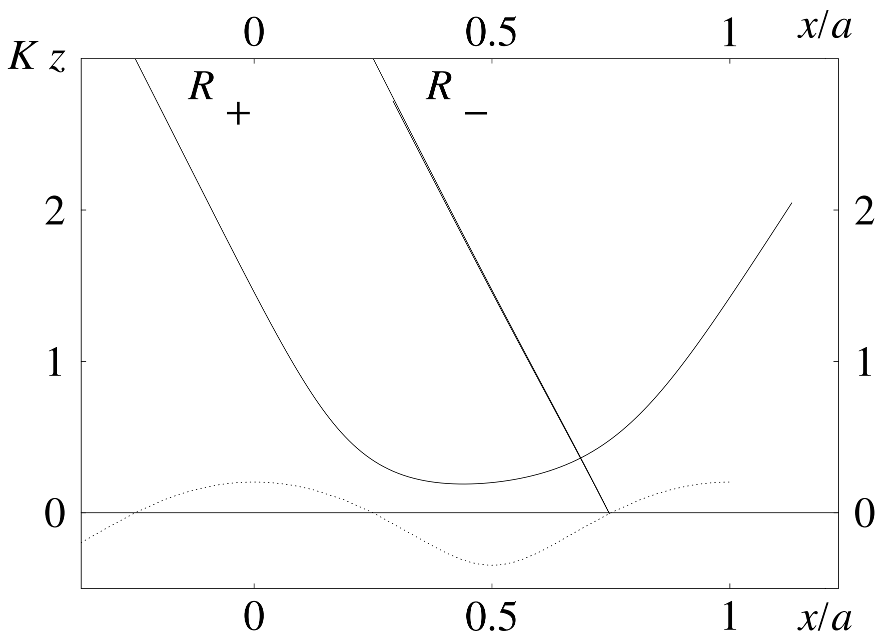

Figure 6.13: Trajectoires classiques pour le transfert de vitesse maximal. Incidence oblique. Pointillées : surface de rebroussement.

au-dessus de la surface de rebroussement. Les trajectoires sont courbées par la composante du gradient perpendiculaire à la vitesse atomique et par conséquent, elles ne pénètrent pas davantage dans le réseau où la force est plus grande. En outre, leur composante de vitesse perpendiculaire à la force est conservée. Elles subissent donc un transfert de vitesse moins grande que si elles atteignaient la surface de rebroussement.

Les trajectoires « $R_\pm$ » de la figure 6.13 sont incidentes en incidence oblique. Leur vitesse incidente et leurs positions d'impact sont choisies telles qu'elles correspondent à l'extremum pour le transfert de vitesse $\Delta v_x^-(v_{xi})$. La trajectoire « R_- » (transfert de vitesse Δv_x^-) atteint la surface de rebroussement sur une pente positive et y est rétroréfléchie. Pour cette raison, son transfert de vitesse est plus important que celui des trajectoires « N » : elle s'arrête sur la surface de rebroussement, et sa vitesse est complètement renversée. Cet argument montre que le transfert de vitesse peut être plus important en incidence oblique qu'en incidence normale.

La trajectoire « R_+ » s'approche de la surface de rebroussement au voisinage d'une pente négative. Toutefois, avant de l'atteindre, elle en est déviée par le gradient du potentiel, comme les trajectoires « N », et son transfert de vitesse Δv_x^+ est moins important que celui de la trajectoire « R_- ». Ceci explique pourquoi, en incidence oblique, les positions des deux pics dans la distribution de vitesse ne sont pas symétriques par rapport à $\Delta v_x = 0$ (voir la distribution sur la figure 6.10).

Les propriétés de la trajectoire « R_- » énoncées ci-dessus permettent de calculer la valeur extrême du transfert de vitesse Δv_x^- : d'abord, puisqu'elle est rétroréfléchie en elle-même, son transfert de vitesse est relié à la vitesse incidente par

$$\Delta v_x^- \left(v_{xi}^{\mathrm{ext}} \right) = -2 v_{xi}^{\mathrm{ext}} \tag{6.36}$$

Cette relation est réprésentée par la droite en pointillées sur la figure 6.11. On constate que le minimum du transfert de vitesse $\Delta v_x^-(v_{xi})$ se trouve en effet sur cette droite. D'autre part, elle arrive perpendiculairement à la surface de rebroussement. Dans la limite d'un contraste faible, la pente la plus grande de la surface $z_{\mathrm{reb}}(x)$ vaut $\epsilon(q/\kappa)$. En approximant l'angle entre la trajectoire à la position d'impact et l'axe vertical par l'angle d'incidence, on trouve alors la vitesse incidente

$$\text{calcul numérique :} \qquad v_{xi}^{\mathrm{ext}} \simeq \epsilon(q/\kappa) v_{zi}. \tag{6.37}$$

Les relations (6.36) et (6.37) impliquent que la valeur extrême du transfert de vitesse vaut

$$\Delta v_x^-(v_{xi}^{\mathrm{ext}}) = -2\epsilon(q/\kappa) v_{zi}, \tag{6.38}$$

en accord avec la valeur extrême ($\beta = 1$) de la prévision perturbative (6.33).

Remarque. Ce raisonnement permet de confirmer, pour l'incidence oblique aussi, le critère de validité (6.29) du calcul perturbatif. Rappelons à cet effet que la vitesse v_{xi}^{ext} (6.37) pour laquelle le transfert de vitesse est extrême, est différente de la prévision perturbative (6.34). En comparant à la figure 6.11, nous pouvons estimer que le calcul perturbatif est valable si ce déplacement de l'extremum du transfert de vitesse est petit par rapport à sa largeur caractéristique δv_{xi} (6.35) :

$$v_{xi}^{\text{ext}} \ll \delta v_{xi} \tag{6.39}$$

On en déduit le critère suivant

$$\epsilon \frac{q^2}{\kappa^2} \ll 1. \tag{6.40}$$

Pour un contraste faible, il est équivalent à celui du réseau géométriquement mince (6.29) introduit dans le paragraphe précédent.

Annexe

6.A Calcul du transfert de vitesse au premier ordre

Nous calculons dans cette annexe le transfert de vitesse horizontal au premier ordre ainsi que le facteur d'obliquité $\beta(\xi)$ défini à l'équation (6.12).

Dans l'équation du mouvement au premier ordre (6.8), nous faisons le changement de variable

$$t \mapsto \tau = t/\tau_{\text{int}}. \tag{6.A.1}$$

La vitesse horizontale au premier ordre prend alors la forme

$$v_x^{(1)}(t) = \epsilon \frac{q v_{zi}}{\kappa} \operatorname{Im} \mathrm{e}^{2\mathrm{i}qx_{\text{reb}}} \int_{-\infty}^{t/\tau_{\text{int}}} \mathrm{d}\tau' \, \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi\tau'}}{\cosh^2 \tau'} \tag{6.A.2}$$

où $\xi = 2qv_{xi}\tau_{\text{int}}$. Il suffit donc de calculer la fonction complexe

$$F(\xi, \tau) \equiv \int_{-\infty}^{\tau} \mathrm{d}\tau' \, \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi\tau'}}{\cosh^2 \tau'}. \tag{6.A.3}$$

Nous notons que la même fonction détermine l'action au premier ordre en ϵ [l'équation (8.45)] :

$$S_{\text{out}}^{(1)}(t_f) = -\epsilon \frac{M v_{zi}}{2\kappa} \operatorname{Re} \left[\mathrm{e}^{2\mathrm{i}qx_{\text{reb}}} F(\xi, \tau = (t_f - t_{\text{out}})/\tau_{\text{int}}) \right]. \tag{6.A.4}$$

6.A.1 Limite de temps infini

Nous calculons d'abord la valeur de $F(\xi, \tau)$ dans la limite $\tau \to \infty$. L'intégrale (6.A.3) devient alors la transformée de FOURIER de $1/\cosh^2 \tau$:

$$F(\xi, \infty) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau' \, \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi\tau'}}{\cosh^2 \tau'}. \tag{6.A.5}$$

Nous observons les propriétés suivantes

1. pour ξ réel, $F(\xi, \infty)$ est une fonction réelle et paire de ξ parce que l'intégrand est pair ;

2. comme la primitive de $1/\cosh^2 \tau$ est $\tanh \tau$, $F(\xi = 0, \infty) = 2$.

Sans restriction de généralité, nous pouvons alors supposer que $\xi > 0$. Dans le plan complexe pour la variable τ', nous fermons le chemin d'intégration par un demi-cercle à l'infini dans le demi-plan supérieur $\operatorname{Im} \tau' > 0$. Ce cercle ne contribue pas à l'intégrale à cause de l'exponentielle $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi\tau'}$. L'intégrand a des pôles dans le demi-plan supérieur aux positions $\tau_n = \mathrm{i}\pi(2n+1)/2, n = 0, 1, \ldots$ et se comporte comme $-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi\tau'}/(\tau' - \tau_n)^2$ autour des pôles. Le théorème de CAUCHY donne alors l'intégrale sous la forme d'une série géométrique dont la somme vaut

$$F(\xi, \infty) = 2\pi\mathrm{i}(-\mathrm{i}\xi) \sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\pi(n+1/2)} = \frac{\pi\xi}{\sinh(\pi\xi/2)} = 2\beta(\xi). \tag{6.A.6}$$

On constate que ce résultat vérifie les propriétés énoncées ci-dessus.

6.A.2 Cas général

Le changement de variable $\tau \mapsto x = \mathrm{e}^{\tau}$ transforme l'intégrale (6.A.3) en

$$F(\xi, \tau) = 4 \int_0^{\mathrm{e}^{\tau}} \mathrm{d}x \frac{x^{1+\mathrm{i}\xi}}{(1+x^2)^2}. \tag{6.A.7}$$

Nous développons le facteur $(1+x^2)^{-2}$ en une série binomiale et intégrons terme par terme. La convergence à $x = 0$ est assurée par le facteur x dans le numérateur. On obtient alors

$$F(\xi, \tau) = 2\mathrm{e}^{2\tau+\mathrm{i}\xi\tau} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{n+1}{n+1+\mathrm{i}\xi/2} \mathrm{e}^{2n\tau}, \tag{6.A.8}$$

ce que l'on peut écrire à l'aide de la fonction hypergéométrique[8]

$${}_2F_1(a, b\,; c\,; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\,\Gamma(b)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\,\Gamma(b+n)}{\Gamma(c+n)} \frac{z^n}{n!} \tag{6.A.9}$$

sous la forme

$$F(\xi, \tau) = \frac{2}{1+\mathrm{i}\xi/2} \mathrm{e}^{2\tau+\mathrm{i}\xi\tau}\, {}_2F_1(2, 1+\mathrm{i}\xi/2\,; 2+\mathrm{i}\xi/2\,; -\mathrm{e}^{2\tau}). \tag{6.A.10}$$

Dans la limite $\tau \to -\infty$, (6.A.9) montre que la fonction hypergéométrique dans (6.A.10) tend vers l'unité de sorte que $F(\xi, \tau) \propto \mathrm{e}^{2\tau} \ll 1$. Ceci correspond physiquement au fait que l'atome est loin du point de rebroussement et n'a pas encore interagi avec le réseau.

Pour obtenir le comportement de $F(\xi, \tau)$ aux temps longs, nous observons que le changement de variable $\tau \mapsto -\tau$ dans l'intégrale (6.A.3) implique la relation

$$F(\xi, \tau) = 2\beta(\xi) - F(\xi, -\tau)^*, \tag{6.A.11}$$

si ξ est réel. Nous avons donc

$$\tau \to +\infty : \quad F(\xi, \tau) \approx 2\beta(\xi) - \frac{2}{1-\mathrm{i}\xi/2} \mathrm{e}^{-2\tau-\mathrm{i}\xi\tau}. \tag{6.A.12}$$

Le transfert de vitesse (et le déphasage) s'approche donc de sa valeur asymptotique sur une échelle de temps caractéristique donné par le temps d'interaction τ_{int}.

[8] ABRAMOWITZ et STEGUN, *op. cit.*, chap. 15.

Chapitre 7

La diffraction d'atomes dans l'approximation de BORN

Introduction

Nous abordons maintenant l'étude de la figure de diffraction atomique. L'atome est décrit par une fonction d'onde qui est une solution de l'équation de SCHRÖDINGER. Une nouvelle échelle de longueur apparaît dans cette description, qui est la longueur d'onde de DE BROGLIE de l'atome incident. Nous pouvons alors distinguer entre les deux cas limite d'une longueur d'onde atomique soit petite, soit grande comparée aux échelles caractéristiques du réseau de diffraction. Le premier cas correspond au régime semi-classique où la figure de diffraction s'approche de la distribution de vitesse classique. Le deuxième cas représente le régime quantique où la nature ondulatoire de l'atome joue un rôle important pour déterminer la figure de diffraction.

Le premier paragraphe formule le problème de la diffraction d'atomes. Nous identifions les angles de diffraction et introduisons ensuite la fonction d'onde atomique sous la forme d'un état stationnaire de diffusion.

Dans le deuxième paragraphe, nous commençons le calcul des populations des ordres de la figure de diffraction. Nous présentons un calcul perturbatif à l'aide de l'approximation de BORN au premier ordre. Cette approximation consiste à développer la fonction d'onde jusqu'au premier ordre par rapport au contraste ϵ du réseau de diffraction. Elle n'est valable que pour un contraste suffisamment faible de sorte que la fonction d'onde diffère peu de celle obtenue pour un potentiel non modulé. Les populations des ordres non spéculaires $n = \pm 1$ dans la figure de diffraction sont alors faibles devant l'unité, et la plus grande partie de la population atomique reste dans l'ordre spéculaire $n = 0$.

Bien qu'elle soit limitée au régime perturbatif, l'approximation de BORN permet de calculer la figure de diffraction quelle que soit la longueur d'onde de l'onde atomique incidente. Par conséquent, nous pouvons nous en servir dans les deux régimes semi-classique et quantique. Dans le troisième paragraphe, nous étudierons la limite semi-classique de la diffraction, pour une vitesse incidente beaucoup plus grande que la vitesse de recul. Nous montrons en particulier l'influence de l'épaisseur non nulle de l'onde évanescente sur l'efficacité de la diffraction. La figure de diffraction est comparée à la distribution de vitesse classique étudiée au chapitre précédent. Au quatrième paragraphe, le régime quantique (avec une vitesse incidente inférieure à la vitesse de recul) permet de faire un rapprochement entre la diffraction d'atomes par l'onde évanescente stationnaire et celle de la lumière par un réseau métallique.

7.1 Présentation du problème

7.1.1 La théorie cinématique

Les ordres de diffraction

Supposons pour commencer que l'onde atomique soit incidente sur le potentiel dipolaire (5.5) dans le plan xOz, comme représenté à la figure 7.1. Puisque le potentiel dipolaire s'annule dans la région asymptotique loin de la surface du diélectrique, l'onde atomique y est une onde plane. Soient λ_{dB} sa longueur d'onde et θ_i son angle d'incidence, mesuré par rapport à la direction normale. Comme le réseau est invariant suivant la direction Oy, la composante y de la quantité de mouvement atomique est conservée et les ondes diffractées se propagent également dans le plan xOz. Comme le potentiel dipolaire du réseau de diffraction est indépendant du temps, l'énergie est conservée et dans la région asymptotique, l'atome diffracté a la même énergie cinétique que l'atome incident. La longueur d'onde des ondes diffractées vaut donc également λ_{dB}. Nous notons θ_n l'angle entre l'onde diffractée dans l'ordre n et la normale.

Les angles de diffraction θ_n sont déterminés par la condition que les ondes atomiques réfléchies par le réseau interfèrent de façon constructive dans cette direction. Sur la figure 7.1, nous représentons les ondes atomiques par des fronts d'ondes associés à des trajectoires classiques. Pour que l'interférence soit constructive, il faut que la différence de marche entre les ondes réfléchies par deux périodes voisines du réseau soit un multiple entier de la longueur d'onde atomique. Sur la figure 7.1, cette différence de marche correspond à la différence de «chemin atomique» $AB - A'B'$. Nous notons que la périodicité du réseau implique que les deux trajectoires atomiques ($A \to C$ et $C' \to B'$) sont simplement décalées l'une par rapport à l'autre. Pour calculer leur différence de marche, on peut donc se placer dans la région asymptotique où les trajectoires sont droites.[1] Nous sommes alors ramené à la construction habituelle des angles de diffraction : la différence de marche est donnée par $CB - A'C'$ et l'on trouve l'équation suivante pour l'angle θ_n

$$a\,(\sin\theta_n - \sin\theta_i) = n\lambda_{\mathrm{dB}}, \qquad n = 0, \pm 1, \ldots \tag{7.1}$$

[1] Le fait que les trajectoirs soient courbes à l'intérieur du réseau n'a donc pas d'influence sur les angles de diffraction.

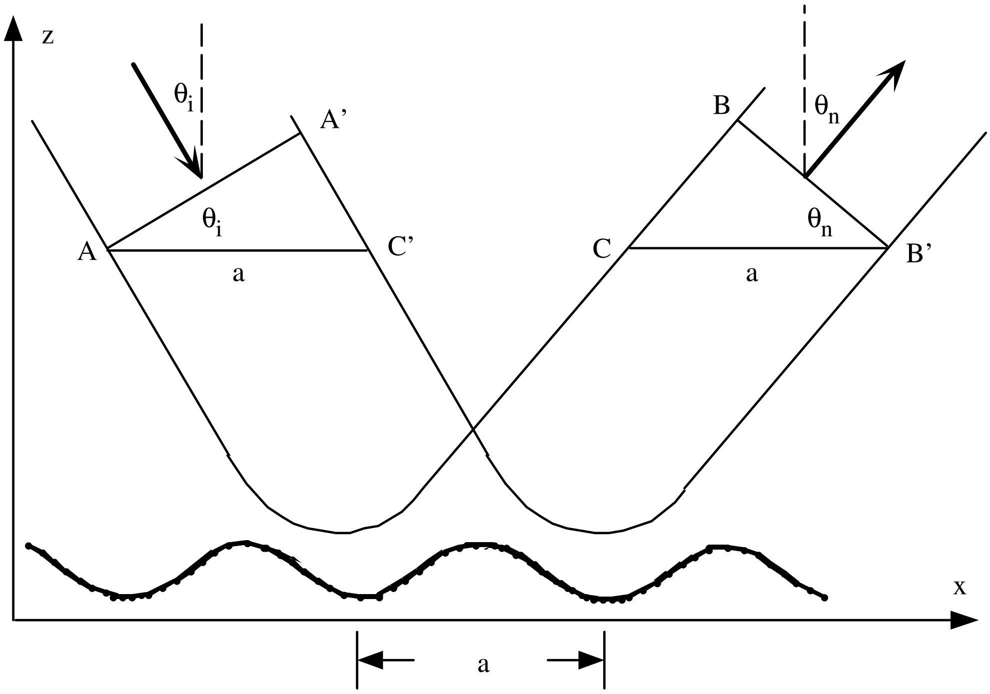

Figure 7.1: Construction des angles de diffraction.

où a est la période du réseau (5.3).

Au lieu de caractériser les ordres de diffraction par les angles θ_n, nous calculons maintenant leurs vecteurs d'onde. Le vecteur d'onde incident a les composantes $(k_{xi}, -k_{zi})$ dans le plan d'incidence, avec

$$k_{xi} = k_i \sin\theta_i, \quad k_{zi} = k_i \cos\theta_i. \tag{7.2}$$

Sa composante normale est négative parce que l'onde incidente se propage vers le réseau de diffraction. Le module k_i du vecteur d'onde incident est relié, d'une part, à la longueur d'onde de BROGLIE par la relation $k_i \equiv 2\pi/\lambda_{\mathrm{dB}}$. D'autre part, il est proportionnel au module v_i de la vitesse incidente de l'atome, grâce à la formule de DE BROGLIE

$$\hbar k_i = \frac{h}{\lambda_{\mathrm{dB}}} = M v_i. \tag{7.3}$$

Les composantes (k_{xn}, k_{zn}) des vecteurs d'onde diffractés sont données par des expressions analogues à (7.2) en fonction des angles θ_n.

La condition d'interférence constructive (7.1) s'écrit alors

$$k_{xn} = k_{xi} + \frac{2\pi n}{a} = k_{xi} + 2nq, \qquad n = 0, \pm 1, \ldots \tag{7.4}$$

Dans la direction Ox parallèle au pas du réseau, l'onde atomique diffractée reçoit donc un transfert de vecteur d'onde égal à un vecteur $2nq$ du réseau réciproque du

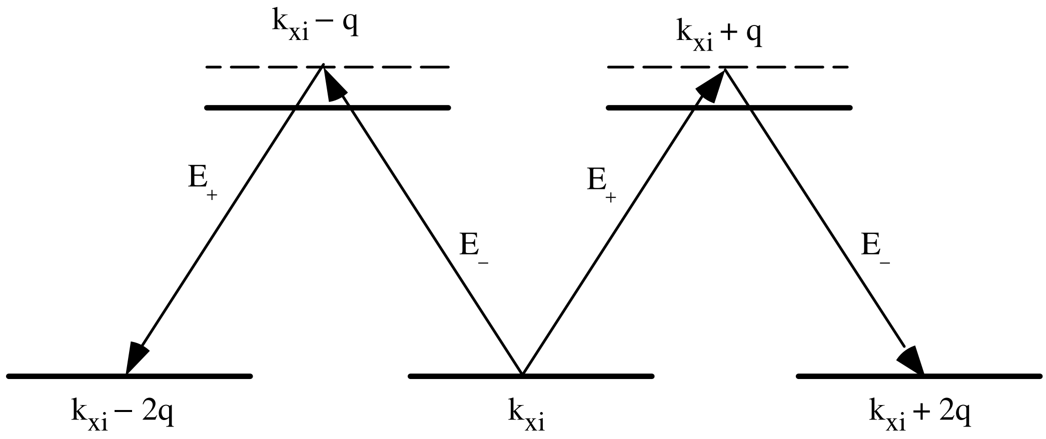

Figure 7.2: Interprétation de la diffraction à l'aide de processus d'absorption et d'émission stimulée.

potentiel périodique. Par conservation d'énergie, la composante normale du vecteur d'onde diffracté vaut

$$k_{zn} = \sqrt{k_{zi}^2 - 4nq\,(k_{xi} + nq)}, \qquad n = 0, \pm 1, \ldots \tag{7.5}$$

Remarque 1. Dans le régime quantique où la longueur d'onde de DE BROGLIE est grande devant les échelles spatiales du réseau, il n'est plus possible d'attribuer des trajectoires classiques à l'onde atomique diffractée. L'on pourrait alors remettre en cause la démonstration de la figure 7.1. Mais, nous pouvons interpréter l'équation (7.4) de façon complètement quantique, en invoquant des processus d'absorption et d'émission stimulée (voir la figure 7.2) : par exemple, lorsque l'onde atomique absorbe un photon de l'onde évanescente E_+ qui se propage dans la direction des x croissants [voir le champ lumineux (5.1)], elle reçoit un transfert de vecteur d'onde $+q$; l'émission stimulée d'un photon dans l'onde contra-propageante E_- lui communique un autre transfert $+q$. Après le processus complet, le vecteur d'onde horizontal de l'onde atomique a donc changé de $+2q$, alors que l'énergie (la fréquence) de l'onde atomique est conservée parce que les deux ondes lumineuses ont la même fréquence et que le processus d'émission est stimulé.

Si nous nous plaçons dans un référentiel en co-mouvement avec l'atome, l'effet DOPPLER déplace les fréquences des deux ondes lumineuses d'une quantité $\Delta_D = qv_{xi}$. L'énergie de l'atome change alors d'une quantité $2\hbar\Delta_D$ après un processus d'absorption et d'émission stimulée. Ce changement d'énergie correspond au terme croisé (en nq) dans l'expression (7.5) pour le vecteur d'onde diffracté k_{zn}. Le dernier terme (en n^2q^2) dans cette formule représente « l'effet de recul » qui provient du changement de vitesse de l'atome lors de l'absorption d'un photon.

Remarque 2. Si le plan d'incidence atomique ne se confond pas avec le plan xOz (voir la figure 7.3), il suffit d'ajouter aux expressions (7.4) et (7.5) la conservation de la

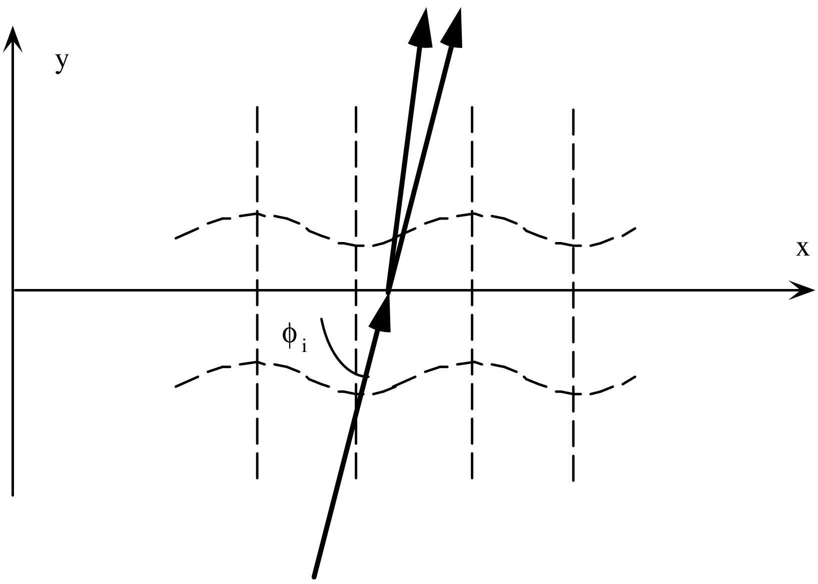

Figure 7.3: Plan d'incidence atomique en dehors du plan xOz.

composante y du vecteur d'onde

$$k_{yn} = k_{yi}, \qquad n = 0, \pm 1, \ldots \tag{7.6}$$

pour déterminer les vecteurs d'onde des ondes diffractées. Nous notons que le transfert de vecteur d'onde s'effectue encore le long de la direction Ox, la diffraction fait alors sortir l'onde atomique de son plan d'incidence. Les équations (7.4) et (7.6) donnent alors les conditions suivantes pour les angles de diffraction (θ_n, ϕ_n)

$$a\,(\sin\theta_n \cos\phi_n - \sin\theta_i \cos\phi_i) \;=\; n\lambda_{dB}, \tag{7.7a}$$
$$\sin\theta_n \sin\phi_n - \sin\theta_i \sin\phi_i \;=\; 0, \tag{7.7b}$$

où les angles $\phi_{i,n}$ repèrent le plan d'incidence atomique et le plan de l'onde diffractée par rapport au plan xOz. Ces expressions remplacent la condition d'interférence constructive (7.1). Une telle géométrie de diffraction d'atomes a été utilisée par le groupe de Vincent LORENT à l'Université de Paris-Nord [13].

La construction d'EWALD

Il est instructif de se représenter les ordres de diffraction à l'aide de la construction d'EWALD (voir la figure 7.4). A cause de la conservation de l'énergie, le vecteur d'onde atomique incident et les vecteurs d'onde diffractés se trouvent sur la même sphère. Comme par ailleurs la composante y du vecteur d'onde est conservée, on peut se restreindre à une coupe circulaire de cette sphère. Cette coupe est représentée par le cercle de la figure 7.4 dont le rayon vaut k_i. Les composantes horizontales k_{xn} (7.4) des vecteurs d'onde diffractés se trouvent sur un ensemble de lignes verticales équidistantes

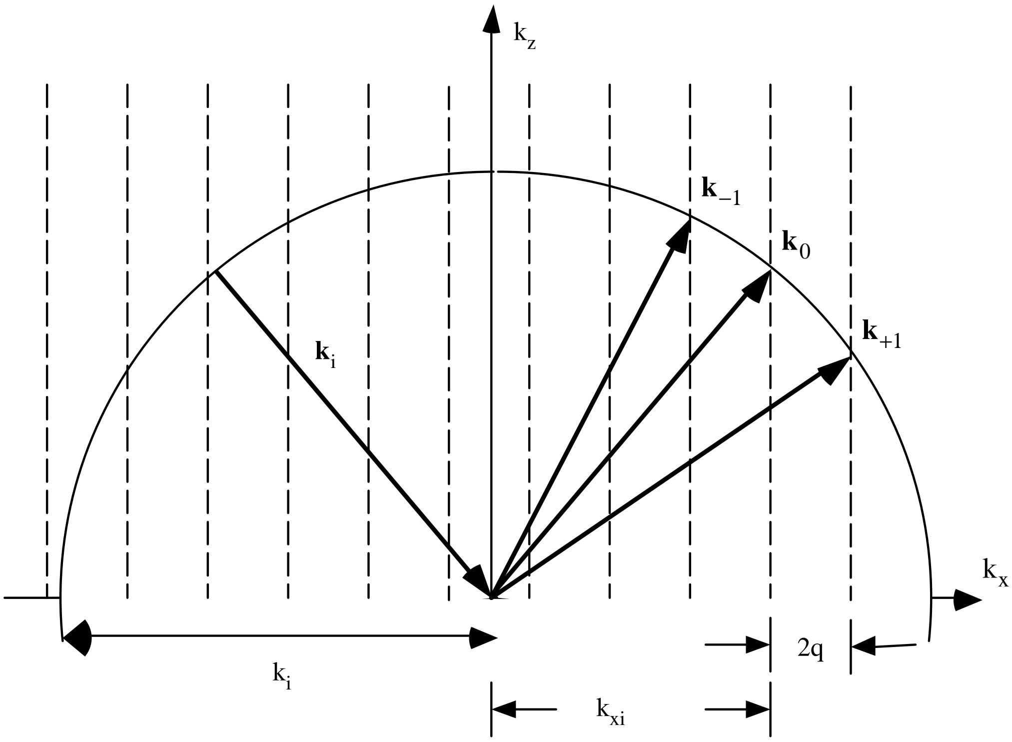

*Figure 7.4: La construction d'*EWALD *pour les ordres de diffraction.*

de $2q$ qui correspond au réseau réciproque du potentiel dipolaire périodique. On obtient les vecteurs d'onde diffractés aux points d'intersection entre le cercle et le réseau réciproque. Nous notons qu'il n'y a qu'un nombre fini d'intersections, le nombre des ordres qui apparaissent dans la figure de diffraction est donc limité.

A l'aide de la construction d'EWALD, nous étudions maintenant l'influence de la hauteur de la barrière de potentiel sur les ordres qui sont accessibles dans la figure de diffraction. Nous rappelons que la vitesse maximale $v_{\max}$ introduite dans (5.8) fixe un vecteur d'onde maximal $k_{\max} \equiv Mv_{\max}/\hbar$. La condition de réflexion (5.10) correspond alors à une limite horizontale dans le diagramme d'EWALD : les atomes sont réfléchis si leur vecteur d'onde se trouve en-dessous de cette ligne.[2] Nous nous limiterons au cas où le vecteur d'onde maximal $k_{\max}$ est beaucoup plus grand que l'espacement $2q$ entre les ordres.[3]

Nous pouvons alors distinguer quatre régimes différents pour le nombre des ordres accessibles dans la figure de diffraction :

1. Tout d'abord, si le vecteur d'onde incident k_i est inférieur au pas élémentaire $2q$ du réseau réciproque du potentiel, seul l'ordre spéculaire existe dans la figure de diffraction, quel que soit l'angle d'incidence (voir la figure 7.5 à gauche). Les transferts de vecteur d'onde sont alors interdits par la conservation d'énergie. (En fait, les vecteurs d'onde diffractés k_{zn} sont tous imaginaires de sorte que les ondes diffractées ne peuvent se propager dans la région asymptotique au-dessus du réseau. De telles «ondes atomiques évanescentes» restent localisées dans le réseau de diffraction.)

   Ce régime est difficile à réaliser expérimentalement parce que la vitesse incidente dans le plan xOz doit être inférieure à $\hbar q/M$, ce qui est de l'ordre de la vitesse de recul $\hbar k_L/M$. Une solution possible est de choisir le plan yOz comme plan d'incidence et d'utiliser l'incidence rasante pour réduire les vitesses atomiques dans les directions Ox et Oz.

2. Pour un vecteur d'onde incident k_i de l'ordre de quelques q, un petit nombre d'ordres non spéculaires apparaissent dans la figure de diffraction, avec de grandes séparations angulaires. (Voir la figure 7.5 à droite.) Comme la longueur d'onde atomique est alors comparable à la période du réseau, ce régime est dominé par les effets ondulatoires. Pour une réalisation expérimentale possible, voir 1.

[2]En principe, il est possible que l'atome gagne de l'énergie cinétique pendant qu'il sort du réseau de diffraction et que son vecteur d'onde normal k_{zf} soit plus grand que $k_{\max}$. Mais c'est un problème de la théorie dynamique de la diffraction de déterminer la valeur maximale de k_{zf}. Pour l'instant, nous allons nous contenter de comparer les vecteurs d'onde diffractés à $k_{\max}$.

[3]Dans les réalisations expérimentales du miroir à l'onde évanescente, la vitesse maximale $v_{\max}$ est généralement grande devant la vitesse de recul $\hbar k_L/M$. Comme le vecteur d'onde q de l'onde stationnaire est de l'ordre du vecteur d'onde optique k_L, la condition $k_{\max} \gg q$ est donc généralement satisfaite.

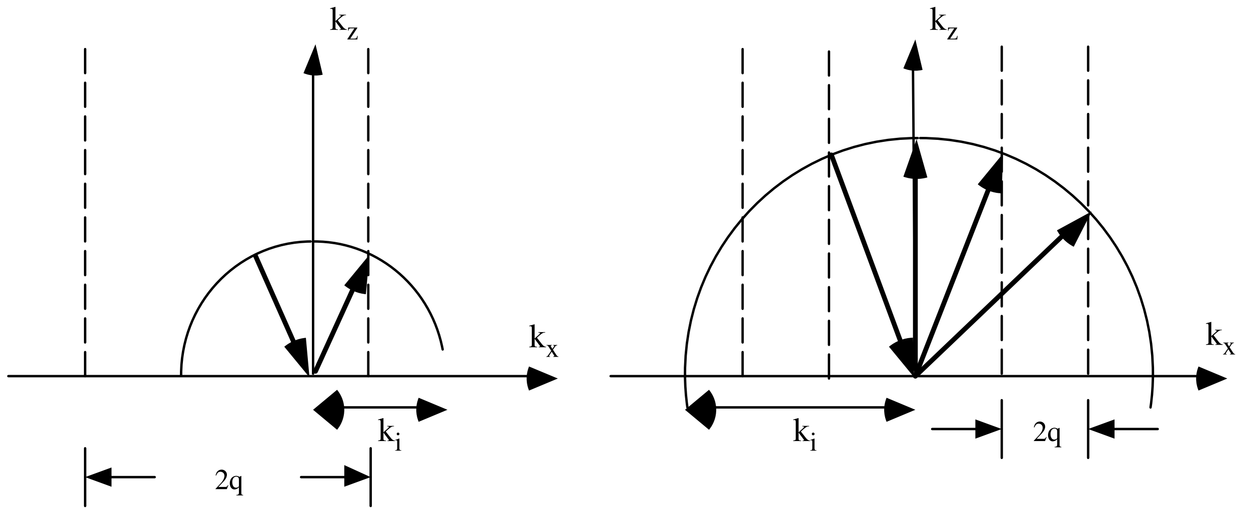

*Figure 7.5: Construction d'*EWALD *pour une énergie incidente très basse. A gauche : $k_i < q$. A droite : $k_i \gtrsim q$.*

3. Ensuite, pour un vecteur d'onde incident k_i beaucoup plus grand que q, mais inférieur au vecteur d'onde maximal $k_{\max}$, un grand nombre d'ordres est accessibles, indépendamment de l'angle d'incidence (voir la figure 7.6). Cette situation est généralement réalisée dans les expériences de réflexion d'atomes en incidence normale. La séparation angulaire entre les ordres de diffraction est alors petite : à partir de (7.1), on trouve qu'en incidence normale ($\theta_i = 0$), les angles des premiers ordres valent approximativement

$$\theta_{\pm 1} \approx \pm \frac{2q}{k_i}\,; \tag{7.8}$$

et qu'en incidence rasante ($\theta_i \to \pi/2$), l'angle de l'ordre $n = -1$ vaut

$$\theta_{-1} \approx \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{q}{k_i}}. \tag{7.9}$$

(En incidence rasante, les ordres $n = +1, +2, \ldots$ sont interdits par la conservation d'énergie.) Nous notons qu'en incidence rasante, la séparation angulaire entre les ordres de diffraction est plus grande qu'en incidence normale. La construction d'EWALD montre que cet effet provient des différents angles d'intersection entre le cercle de la conservation d'énergie et le réseau réciproque.

4. Si finalement le vecteur d'onde incident k_i est beaucoup plus grand que $k_{\max}$, les atomes ne peuvent être réfléchis que s'ils sont incidents au voisinage de l'incidence rasante. Les ordres qui apparaissent dans la figure de diffraction sont alors déterminés par les conditions $0 < k_{zn} < k_{\max}$ (voir la figure 7.7). Les premières expériences de diffraction d'atomes ont été réalisées dans ce régime [12, 13] parce qu'il peut être atteint avec un faisceau atomique de vitesse élevée.

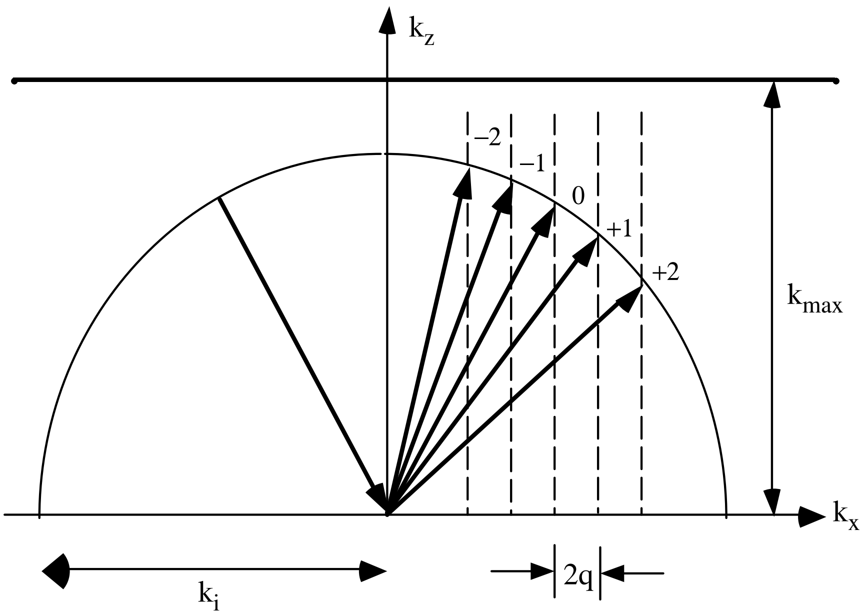

*Figure 7.6: Construction d'*EWALD *pour une énergie incidente élevée, mais inférieure à la hauteur de la barrière de potentiel :* $q \ll k_i < k_{\max}$.

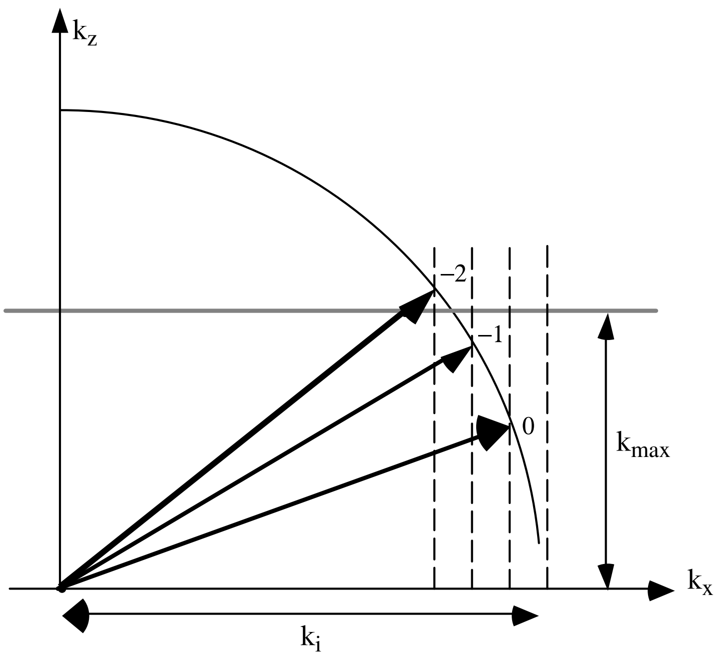

Figure 7.7: Ordres de diffraction pour une énergie incidente au-dessus de la hauteur de la barrière de potentiel : $k_i \gg k_{\max}$.

Remarque. La séparation angulaire entre les ordres de diffraction est une quantité importante pour des raisons expérimentales : comme on mesure généralement les composantes des vitesses atomiques perpendiculaires à la direction de l'ordre spéculaire, les écarts entre les ordres de la figure de diffraction sont proportionnels à leurs séparations angulaires. En incidence normale, une résolution de vitesse de l'ordre de la vitesse de recul $\hbar k_L/M$ est nécessaire pour résoudre les ordres de diffraction. En revanche, une résolution de vitesse de l'ordre de $\sqrt{(\hbar k_L/M)v_{xi}}$ suffit en incidence rasante.

7.1.2 L'état stationnaire de diffusion

L'équation de SCHRÖDINGER

Nous nous plaçons dans le point de vue de l'équation de SCHRÖDINGER stationnaire pour formuler le problème de la diffraction d'atomes. Nous cherchons la fonction d'onde atomique sous la forme d'un état stationnaire de diffusion : un tel état est solution de l'équation de SCHRÖDINGER stationnaire[4]

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,z)+V(x,z)\,\psi(x,z)=E_i\,\psi(x,z)\,, \tag{7.10}$$

où $V(x,z)$ est le potentiel dipolaire (5.5) de l'onde évanescente stationnaire. La valeur propre de l'énergie E_i est donnée par les composantes du vecteur d'onde incident dans le plan xOz et vaut

$$E_i=\frac{\hbar^2}{2M}k_i^2=\frac{\hbar^2}{2M}\left(k_{xi}^2+k_{zi}^2\right). \tag{7.11}$$

Conditions asymptotiques

Nous imposons deux conditions à l'état stationnaire de diffusion. La première porte sur son comportement dans la région asymptotique où le potentiel dipolaire s'annule :

$$\begin{aligned} &z\to+\infty\ : \\ &\quad\psi(x,z)\ =\ \exp\mathrm{i}\left(k_{xi}x-k_{zi}z\right)+\sum_n a_n\,\exp\mathrm{i}\left(k_{xn}x+k_{zn}z\right). \end{aligned} \tag{7.12}$$

Dans cette région, la fonction d'onde contient l'onde incidente et une somme d'ondes diffractées[5] dont les vecteurs d'ondes sont données par la théorie cinématique du paragraphe précédent [les équations (7.4) et (7.5)]. Les coefficients complexes a_n de cette somme sont les *amplitudes de diffraction*. Leurs normalisations ainsi que leurs phases sont fixées par la forme de l'onde incidente et des ondes diffractées dans le

---

[4]Comme la composante y du vecteur d'onde atomique est conservée (7.6), la dépendance en y de la fonction d'onde atomique se réduit à un facteur multiplicatif $\exp \mathrm{i}k_{yi}y$ que nous omettons.

[5]La somme dans (7.12) ne contient que les ondes diffractées dont la composante k_{zn} (7.5) du vecteur d'onde est réelle. Des valeurs imaginaires de k_{zn} correspondent à des « ondes atomiques évanescentes » qui ne contribuent pas à la fonction d'onde dans la région asymptotique $z\to+\infty$.

développement asymptotique (7.12). Nous verrons au paragraphe suivant que les amplitudes de diffraction déterminent les populations des ordres de la figure de diffraction atomique.

La deuxième condition asymptotique concerne le comportement de la fonction d'onde à l'intérieur du réseau de diffraction. Du point de vue classique, l'atome ne peut entrer dans la région $z < z_{\rm reb}(x)$ au-dessous de la surface de rebroussement parce que l'énergie potentielle y est supérieure que l'énergie cinétique incidente.[6] La fonction d'onde atomique doit donc y tendre vers zéro :

$$z \to -\infty : \quad \psi(x, z) \to 0. \tag{7.13}$$

Dans cette formulation, nous supposons que l'expression du potentiel dipolaire (5.5) est valable pour toutes les positions z, nous ne tenons donc pas compte de la surface du diélectrique qui limite la hauteur de la barrière de potentiel. Cette approche est justifiée si l'énergie incidente est suffisamment faible pour que la surface de rebroussement classique se trouve loin de la surface du diélectrique : à cause de la décroissance de la fonction d'onde dans la région classiquement interdite, la probabilité de présence de l'atome à proximité de la surface est alors petite, si bien que nous pouvons négliger son interaction avec la surface.

Les populations des ordres de diffraction

Dans le développement asymptotique (7.12), considérons l'onde diffractée d'ordre n. Son courant de probabilité $\mathbf{j}_n$ vaut

$$\mathbf{j}_n = C\,\mathrm{Re}\,\frac{\hbar \mathbf{k}_n}{M}|a_n|^2, \tag{7.14}$$

où le facteur global C normalise la fonction d'onde de façon à représenter une probabilité de présence. Le nombre d'atomes diffractés par unité de temps et par unité de surface du plan xOy où se trouve le réseau, est donc donné par[7]

$$\frac{\mathrm{d}N_n}{\mathrm{d}A\,\mathrm{d}t} = j_{zn} = C\,\mathrm{Re}\,\frac{\hbar k_{zn}}{M}\,|a_n|^2\,. \tag{7.15}$$

D'autre part, le nombre d'atomes incidents par unité de temps et unité de surface est donné par le courant de probabilité de l'onde incidente dans (7.12), ce qui donne

$$\frac{\mathrm{d}N_i}{\mathrm{d}A\,\mathrm{d}t} = C\frac{\hbar k_{zi}}{M}. \tag{7.16}$$

[6]Pour un contraste maximal $\epsilon = 1$, une particule classique peut traverser le réseau « au fond des vallées » où le potentiel s'annule. Du point de vue quantique, par contre, la fréquence d'oscillation ω_x au fond de la vallée [voir l'équation (6.27)] devient ultimement tellement grande que l'énergie du point zéro $\frac{1}{2}\hbar\omega_x$ est supérieure à l'énergie incidente et que l'onde atomique est réfléchie.

[7]À cause de la partie réelle Re dans (7.15), les ondes atomiques évanescentes pour lesquelles k_{zn} est imaginaire, ne donnent aucun atome diffracté.

Nous définissons alors une probabilité de diffraction en normalisant le nombre d'atomes diffractés (7.15) par le nombre d'atomes incidents (7.16). C'est cette probabilité que nous identifions à la population w_n de l'ordre n dans la figure de diffraction :

$$w_n = \mathrm{Re}\,\frac{k_{zn}}{k_{zi}}\,|a_n|^2\,. \tag{7.17}$$

Puisque nous supposons dans la condition asymptotique (7.13) qu'il n'y a pas de transmission à travers la barrière de potentiel, le nombre total d'atomes diffractés, sommé sur tous les ordres, est égal au nombre d'atomes incidents. Les populations des ordres sont donc normalisées telles que

$$\sum_n w_n = 1. \tag{7.18}$$

7.2 Calcul perturbatif de la figure de diffraction

7.2.1 Principe du calcul

Par analogie avec le calcul perturbatif de la trajectoire classique de l'atome (6.7), nous écrivons la fonction d'onde atomique $\psi(x,z)$ sous la forme d'un développement

$$\psi(x,z) = \psi^{(0)}(x,z) + \psi^{(1)}(x,z) + \ldots \tag{7.19}$$

où $\psi^{(0)}(x,z)$ est la fonction d'onde pour un contraste ϵ nul, et $\psi^{(1)}(x,z)$ est la correction au premier ordre en ϵ. Dans l'approximation de BORN, nous supposons que cette correction est petite par rapport à la fonction d'onde non perturbée

$$\left|\psi^{(1)}(x,z)\right| \ll \left|\psi^{(0)}(x,z)\right|. \tag{7.20}$$

Nous pouvons alors résoudre l'équation de SCHRÖDINGER ordre par ordre en ϵ : pour un contraste nul, on trouve le potentiel exponentiel non modulé de l'onde évanescente simple, pour lequel les fonctions d'ondes $\psi^{(0)}(x,z)$ ont été calculées dans la partie précédente.[8] Au premier ordre par rapport au contraste, l'équation de SCHRÖDINGER (7.10) donne l'équation suivante

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi^{(1)}(x,z) + V_{\max}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}\psi^{(1)}(x,z) + & \\ +\epsilon\, V_{\max}\cos 2qx\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}\psi^{(0)}(x,z) \quad = \quad E_i\,\psi^{(1)}(x,z)\,. & \end{aligned} \tag{7.21}$$

Nous notons que dans cette équation, la partie modulée du potentiel n'agit que sur la fonction d'onde non perturbée $\psi^{(0)}(x,z)$ qui est une fonction donnée. Nous allons

[8] A cause de la réflexion par le potentiel non modulé, les fonctions d'onde non perturbées $\psi^{(0)}(x,z)$ diffèrent d'ondes planes. C'est pour cette raison que dans ce contexte, l'approximation de BORN est aussi appelée « approximation de BORN à partir d'ondes modifiées » (*distorted wave Born approximation*) [58].

résoudre l'équation (7.21) en utilisant une fonction de GREEN. Le développement de la fonction d'onde $\psi^{(1)}(x, z)$ dans la région asymptotique $z \to \infty$ donne alors les amplitudes de diffraction. Nous devons nous assurer *a posteriori* de la validité du résultat en vérifiant que la condition (7.20) est satisfaite.

Remarque. Une présentation alternative de l'approximation de BORN est basée sur la règle d'or de FERMI : dans ce cadre, la partie modulée du réseau de diffraction induit des transitions entre les fonctions d'ondes non perturbées, qui sont caractérisées par une section efficace différentielle de diffusion donnée par

$$\frac{\mathrm{d}\Sigma}{\mathrm{d}\Omega_f} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{j_i} \left| \left\langle \bar{\psi}_f^{(0)}(\mathbf{r}) \right| \epsilon V_{\max} \cos 2qx \, \mathrm{e}^{-2\kappa z} \left| \bar{\psi}_i^{(0)}(\mathbf{r}) \right\rangle \right|^2 \frac{\mathrm{d}n_f}{\mathrm{d}E \, \mathrm{d}\Omega_f}. \tag{7.22}$$

Cette approche présente néanmoins de nombreux inconvénients d'ordre technique. La section efficace (7.22) est formulée pour une situation en trois dimensions, les fonctions d'ondes initiale et finale $\bar{\psi}_{i,f}^{(0)}(\mathbf{r})$ doivent être normalisées, et pour obtenir les probabilités de diffraction, il est nécessaire de normaliser la section efficace elle-même. Dans l'annexe 7.A, nous montrons l'équivalence entre cette approche et la démarche que nous suivons dans ce paragraphe-ci.

7.2.2 Solution non perturbée

Nous rappelons qu'en absence de modulation, la fonction d'onde est donnée par le produit direct d'une onde plane (dans la direction horizontale) et d'une fonction propre $\phi_{k_{zi}}(z)$ du potentiel dipolaire d'une onde évanescente simple (dans la direction normale). La fonction propre $\phi_{k_{zi}}(z)$ est donnée à l'équation (7.B.29). Dans la région asymptotique loin de l'onde évanescente, elle a le comportement asymptotique suivant

$$z \to \infty : \qquad \phi_{k_{zi}}(z) = \sin\Big[k_{zi}z + \tfrac{1}{2}\Delta\varphi(k_{zi})\Big] \,, \tag{7.23}$$

où $\Delta\varphi(k_{zi})$ est le déphasage de l'onde atomique à la réflexion donné à (7.B.31). Dans la région classiquement interdite, la fonction propre $\phi_{k_{zi}}(z)$ décroît vers zéro, en accord avec la condition asymptotique (7.13). Nous trouvons donc le résultat suivant pour la fonction d'onde non perturbée

$$\psi^{(0)}(x, z) = -2\mathrm{i} \, \exp\Big[\tfrac{\mathrm{i}}{2}\Delta\varphi(k_{zi})\Big] \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_{xi}x} \, \phi_{k_{zi}}(z) \,, \tag{7.24}$$

où le préfacteur tient compte de l'amplitude de l'onde incidente dans la condition asymptotique (7.12).

Pour un contraste nul, la réflexion est spéculaire et seule l'amplitude $a_0^{(0)}$ dans le développement (7.12) est non nulle avec

$$a_0^{(0)} = -\exp \mathrm{i}\Delta\varphi(k_{zi}). \tag{7.25}$$

7.2.3 Solution au premier ordre

En introduisant l'abbréviation

$$U \equiv \frac{2M}{\hbar^2} V_{\max}, \tag{7.26}$$

nous pouvons écrire l'équation du premier ordre (7.21) sous la forme

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - U\mathrm{e}^{-2\kappa z} + k_i^2 \right) \psi^{(1)}(x,z) = \epsilon\, U \cos 2qx\, \mathrm{e}^{-2\kappa z} \psi^{(0)}(x,z)\,. \tag{7.27}$$

L'approximation de BORN implique que le membre droit de cette équation est une fonction connue, donnée par la fonction d'onde non perturbée $\psi^{(0)}(x,z)$. Pour trouver la correction $\psi^{(1)}(x,z)$, nous avons donc à résoudre une équation inhomogène aux dérivées partielles. Introduisons à cet effet la fonction de GREEN du présent problème : cette fonction est définie par l'équation différentielle

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - U\mathrm{e}^{-2\kappa z} + k_i^2 \right) G_{k_i}(x,z\,;x',z') = \delta(x-x')\,\delta(z-z') \tag{7.28}$$

et satisfait aux conditions asymptotiques suivantes :

1. en fonction de (x,z) et dans la région classiquement interdite $z \to -\infty$, la fonction de GREEN $G_{k_i}(x,z\,;x',z')$ décroît vers zéro ;

2. dans la région asymptotique $z \to \infty$, $G_{k_i}(x,z\,;x',z')$ (à x', z' fixés) ne contient que des ondes atomiques *sortantes*, c'est-à-dire des ondes qui se propagent dans la direction des z croissants.

La fonction de GREEN $G_{k_i}(x,z\,;x',z')$ permet d'écrire la solution générale de (7.27) de la façon suivante

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(x,z) = {} & \{\text{solution de l'équation homogène}\} + \\ & \epsilon \int \mathrm{d}x'\mathrm{d}z'\, G_{k_i}(x,z\,;x',z')\, U \cos 2qx'\, \mathrm{e}^{-2\kappa z'} \psi^{(0)}(x',z')\,. \end{aligned} \tag{7.29}$$

Pour trouver la solution de l'équation homogène dans cette expression, nous allons imposer les conditions asymptotiques (7.13) et (7.12) à la fonction d'onde totale $\psi^{(0)}(x,z) + \psi^{(1)}(x,z)$. Dans la région classiquement interdite $z \to -\infty$, la fonction d'onde $\psi^{(0)}(x,z)$ et le deuxième terme dans (7.29) qui fait intervenir la fonction de GREEN, décroîssent vers zéro. Il s'ensuit que la solution homogène dans (7.29) doit aussi tendre vers zéro dans cette limite. Par conséquent, en fonction de z, elle est une somme de fonctions propres $\phi_{k_z}(z)$. Dans la région asymptotique $z \to +\infty$, les fonctions propres $\phi_{k_z}(z)$ ont toutes un comportement de la forme (7.23), elles contiennent à la fois une onde incidente et une onde réfléchie. Cependant, la fonction d'onde d'ordre zéro $\psi^{(0)}(x,z)$ (7.24) tient déjà compte de l'amplitude de l'onde incidente qu'impose la condition asymptotique (7.12). Nous en concluons que la seule solution homogène possible dans (7.29) est identiquement nulle.

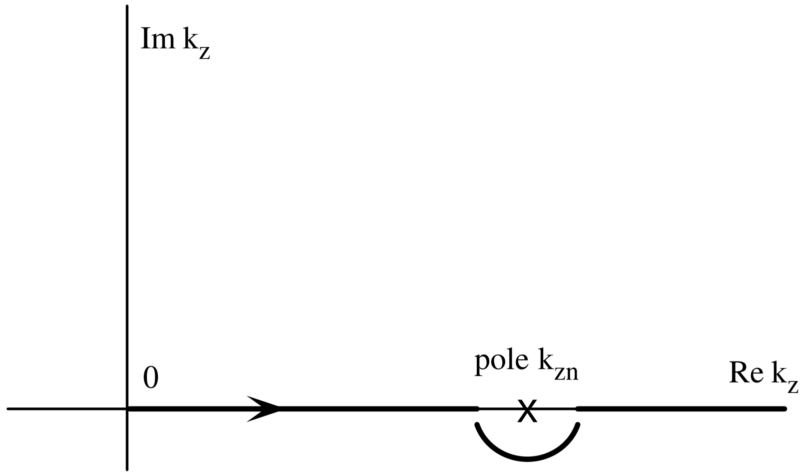

Figure 7.8: Chemin d'intégration pour k_z dans la fonction de GREEN *(7.30).*

La fonction d'onde $\psi^{(1)}(x,z)$ est donc donnée par l'intégrale dans (7.29) qui fait intervenir la fonction de GREEN. Dans l'annexe 7.B, nous montrons que la fonction de GREEN qui vérifie les conditions asymptotiques énoncées ci-dessus est donnée par

$$G_{k_i}(x,z\,;x',z') = \frac{1}{\pi^2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k_x \int\limits_{\mathcal{C}}\mathrm{d}k_z\,\frac{\phi_{k_z}(z)\,\phi_{k_z}(z')\;\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x(x-x')}}{k_i^2-k_x^2-k_z^2}. \tag{7.30}$$

Les fonctions d'ondes $\phi_{k_z}(z')$ sont les fonctions propres du potentiel exponentiel, leur normalisation dans la région asymptotique est la même qu'à l'équation (7.23). L'intégrale sur k_z dans la fonction de GREEN est calculée le long du chemin d'intégration $\mathcal{C}$ indiqué sur la figure 7.8 : il contourne le pôle situé à $k_z = (k_i^2 - k_x^2)^{1/2}$ en passant par le demi-plan inférieur du plan complexe.

En insérant l'expression (7.30) de la fonction de GREEN dans l'intégrale (7.29) pour la fonction d'onde $\psi^{(1)}(x,z)$ et en échangeant l'ordre des intégrations, on constate que les intégrales sur x' donnent des fonctions δ localisées aux vecteurs d'ondes k_{xn} (7.4) pour les ordres de diffraction $n = \pm 1$. L'intégration sur k_x est alors immédiate et nous obtenons le résultat suivant

$$\begin{aligned}\psi^{(1)}(x,z) = {} & -\frac{2\mathrm{i}\epsilon}{\pi}\,\exp\!\left[\tfrac{\mathrm{i}}{2}\Delta\varphi(k_{zi})\right]\;\times \\ & \times\sum_{n=\pm1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_{xn}x}\int\limits_{\mathcal{C}}\mathrm{d}k_z\,\frac{\phi_{k_z}(z)}{k_{zn}^2-k_z^2}\;\langle\phi_{k_z}(z')|\,U\mathrm{e}^{-2\kappa z'}\,|\phi_{k_{zi}}(z')\rangle\,,\end{aligned} \tag{7.31}$$

où nous avons écrit l'intégrale sur z' comme un élément de matrice.

7.2.4 Amplitudes et populations des ordres non spéculaires

Pour trouver les amplitudes de diffraction, nous développons la fonction d'onde (7.31) dans la région asymptotique $z \to \infty$. L'intégrale sur k_z peut alors être évaluée (voir l'annexe 7.B) et on trouve que $\psi^{(1)}(x,z)$ contient les ondes diffractées pour les ordres $n = \pm 1$:

$$z \to \infty \; : \qquad \psi^{(1)}(x,z) = \sum_{n=\pm 1} a_n^{(1)} \, \exp \mathrm{i} \left(k_{xn} x + k_{zn} z \right), \tag{7.32}$$

avec des amplitudes de diffraction données par

$$a_n^{(1)} = \frac{\mathrm{i}\epsilon}{k_{zn}} \left\langle \phi_{k_{zn}}(z) \right| U \mathrm{e}^{-2\kappa z} \left| \phi_{k_{zi}}(z) \right\rangle \, \exp \tfrac{\mathrm{i}}{2} [\Delta\varphi(k_{zi}) + \Delta\varphi(k_{zn})] \,, \qquad n = \pm 1. \tag{7.33}$$

L'amplitude a_0 de l'onde spéculaire n'est pas modifiée au premier ordre en ϵ parce que la valeur moyenne de la partie modulée du potentiel du réseau s'annule (elle ne contient pas de composante de FOURIER à fréquence spatiale nulle).

Finalement, on obtient à partir de (7.33) les populations des ordres de diffraction

$$w_n = \frac{\epsilon^2}{k_{zi} k_{zn}} \left| \left\langle \phi_{k_{zn}}(z) \right| U \, \mathrm{e}^{-2\kappa z} \left| \phi_{k_{zi}}(z) \right\rangle \right|^2, \qquad n = \pm 1, \tag{7.34}$$

où nous rappelons que U est proportionnel à la hauteur $V_{\max}$ du potentiel [voir (7.26)]. L'élément de matrice dans cette expression est évalué dans l'annexe 7.C, avec le résultat

$$\begin{aligned} &\left\langle \phi_{k_{zn}}(z) \right| U \, \mathrm{e}^{-2\kappa z} \left| \phi_{k_{zi}}(z) \right\rangle = \\ &\quad \frac{1}{2\pi} \sqrt{k_{zn} k_{zi} \, \sinh\left(\pi k_{zn}/\kappa\right) \sinh\left(\pi k_{zi}/\kappa\right)} \times \\ &\quad \times \frac{\pi (k_{zn} + k_{zi})/2\kappa}{\sinh \pi (k_{zn} + k_{zi})/2\kappa} \, \frac{\pi (k_{zn} - k_{zi})/2\kappa}{\sinh \pi (k_{zn} - k_{zi})/2\kappa}. \end{aligned} \tag{7.35}$$

Dans les paragraphes suivants, nous étudierons cette expression dans les limites semi-classique et quantique.

Rappelons que les populations (7.34) ont été obtenues dans l'approximation de BORN. L'hypothèse (7.20) que la correction à la fonction d'onde est petite par rapport à la solution non perturbée, implique donc la condition

$$w_n \ll 1, \qquad n = \pm 1. \tag{7.36}$$

Dans l'approximation de BORN, la figure de diffraction contient donc un pic spéculaire fort ($w_0 \approx 1$) et de faibles pics diffractés $w_{\pm 1}$.

Remarque. L'élément de matrice (7.35) est indépendant de U et donc de la valeur $V_{\max}$ du potentiel dipolaire à la surface. Pour interpréter ceci, nous notons que changer $V_{\max}$ revient à déplacer spatialement le potentiel exponentiel, donc la position du point de rebroussement classique. Tant que la hauteur de la barrière de potential reste suffisamment élevée pour que l'atome soit réfléchi, les fonctions d'onde $\phi_{k_{zi,n}}(z)$ sont simplement déplacées par la même distance que le potentiel. Tout ceci correspond donc à un déplacement de la variable d'intégration dans l'élément de matrice, ce qui ne change pas la valeur de l'intégrale.

7.3 Etude de la figure de diffraction dans la limite semi-classique

Dans la limite semi-classique, la longueur d'onde atomique est très courte par rapport aux échelles caractéristiques du réseau de diffraction. Plus précisément, nous considérons la diffraction d'une onde atomique dont les vecteurs d'ondes incident et diffractés vérifient

$$k_{zi}, k_{zn} \gg \kappa. \tag{7.37}$$

Rappelons que ce régime est généralement réalisé dans les expériences de diffraction d'atomes parce que la vitesse incidente v_{zi} est beaucoup plus grande que la « vitesse de recul » $\hbar\kappa/M$.

7.3.1 Les populations des ordres de diffraction

Dans la limite semi-classique, l'élément de matrice (7.35) devient

$$\langle \phi_{k_{zn}}(z)|\, U\, \mathrm{e}^{-2\kappa z}\, |\phi_{k_{zi}}(z)\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{k_{zn}k_{zi}}\frac{k_{zn}+k_{zi}}{2\kappa}\beta\left(\frac{\Delta k_{zn}}{\kappa}\right), \tag{7.38}$$

en négligeant des corrections exponentiellement petites qui sont de l'ordre de $\exp(-\pi k_{zi,n}/\kappa)$. Pour écrire l'expression (7.38), nous nous sommes servi du facteur d'obliquité $\beta(\xi)$ défini à l'équation (6.12). Dans son argument $\xi = \Delta k_{zn}/\kappa$ apparaît le transfert de vecteur d'onde vertical

$$\Delta k_{zn} \equiv k_{zn} - k_{zi}. \tag{7.39}$$

Les populations des premiers ordres de diffraction (7.34) valent donc, dans la limite semi-classique,

$$w_n = \frac{\epsilon^2}{4}\left(\frac{k_{zi}}{\kappa}\right)^2 \left(1+\frac{\Delta k_{zn}}{2k_{zi}}\right)^2 \beta^2\left(\frac{\Delta k_{zn}}{\kappa}\right), \qquad n = \pm 1. \tag{7.40}$$

Nous rappelons que les transferts de vecteur d'onde $\Delta k_{z,\pm 1}$ sont donnés par l'expression suivante [voir (7.5)] :

$$\Delta k_{z,\pm 1} = \sqrt{k_{zi}^2 \mp 4qk_{xi} - 4q^2} - k_{zi}. \tag{7.41}$$

Au voisinage de l'incidence normale, les transferts $\Delta k_{z,\pm 1}$ sont petits et le facteur d'obliquité β dans (7.40) est proche de sa valeur maximale $\beta = 1$. On trouve alors que les populations $w_{\pm 1}$ sont de l'ordre de

$$w_{\pm 1} \sim \left(\frac{\epsilon\, k_{zi}}{2\kappa}\right)^2. \tag{7.42}$$

Le calcul perturbatif de la figure de diffraction est donc valable si le contraste ϵ du réseau satisfait à la condition suivante [voir (7.36)]

$$\epsilon \ll \frac{2\kappa}{k_{zi}}. \tag{7.43}$$

Notons que cette limite pour le contraste est très inférieure à l'unité dans le régime semi-classique. Par conséquent, le domaine de validité de l'approximation de BORN est beaucoup plus restreint que celui de l'approche perturbative dont nous nous sommes servi pour calculer le transfert de vitesse classiques : cette approche classique est valable pour un contraste $\epsilon \lesssim 0.25(\kappa/q)^2$ [voir les équations (6.29) et (6.32)].

7.3.2 Le modèle du miroir effectif ondulé

Pour interpréter l'ordre de grandeur des populations (7.42), reprenons le concept de miroir effectif et plaçons-nous en incidence normale. Lors de notre étude de la réflexion d'atomes par une onde évanescente simple, nous avons trouvé que le déphasage de l'onde atomique, dans le régime semi-classique, peut se mettre sous la forme [voir l'équation (**Pha** 9) dans l'annexe 3.A]

$$\Delta\varphi_{\mathrm{BKW}} = \frac{\pi}{2} - 2k_{zi}\zeta_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{BKW}}. \tag{7.44}$$

Ce déphasage correspond à la réflexion de l'onde atomique par un « miroir effectif » à la position $\zeta_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{BKW}}$ donnée par (**Pha** 10b)

$$\zeta_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{BKW}} = z_{\mathrm{reb}} - \kappa^{-1}\log 2, \tag{7.45}$$

où z_{reb} est la position du point de rebroussement classique.

Supposons maintenant que l'onde évanescente ait un contraste non nul, mais faible. L'ondulation de la surface de rebroussement $z_{\mathrm{reb}}(x)$ définie à l'équation (6.16) implique alors que le miroir effectif est ondulé lui aussi. Si le contraste ϵ est petit devant l'unité, son ondulation est sinusoïdale :

$$\zeta_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{BKW}}(x) = \zeta_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{BKW}} + \frac{\epsilon}{2\kappa}\cos 2qx, \tag{7.46}$$

où l'amplitude de modulation est de l'ordre de la longueur de décroissance $1/\kappa$ de l'onde évanescente, multipliée par le contraste ϵ. Dans l'hypothèse où le front d'onde de l'onde atomique réfléchie reproduit exactement la forme ondulée du miroir effectif[9], le déphasage (7.44) de l'onde atomique réfléchie est donné par (voir la figure 7.9)

$$\Delta\varphi_{\mathrm{BKW}}(x) = \Delta\varphi_{\mathrm{BKW}} - \frac{\epsilon\, k_{zi}}{\kappa}\cos 2qx. \tag{7.47}$$

[9] Cette hypothèse néglige la déformation du front d'onde pendant la propagation de l'onde atomique dans la région au-dessus du miroir.

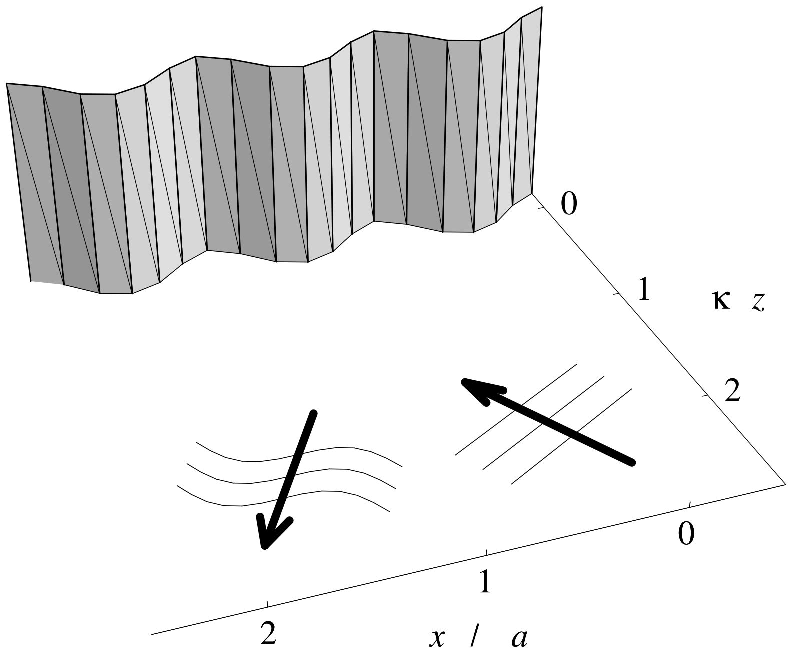

Figure 7.9: Modèle de miroir ondulé.

Son amplitude de modulation est de l'ordre de l'amplitude de l'ondulation du miroir effectif (7.46), divisée par la longueur d'onde atomique incidente.

Dans la limite perturbative caractérisée par le régime (7.43), la modulation du déphasage est faible et l'onde atomique réfléchie contient des bandes latérales

$$\begin{aligned}&\exp \mathrm{i}\left[k_{zi}z + \Delta\varphi_{\mathrm{BKW}}(x)\right] \approx \\ &\qquad \exp \mathrm{i}\left(k_{zi}z + \Delta\varphi_{\mathrm{BKW}}\right)\left(1 - \frac{\mathrm{i}\epsilon k_{zi}}{2\kappa}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}qx} - \frac{\mathrm{i}\epsilon k_{zi}}{2\kappa}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}qx}\right). \qquad (7.48)\end{aligned}$$

Les populations des ordres de diffraction $n = \pm 1$ sont alors données par

$$w_{\pm 1} \simeq \frac{k_{z,\pm 1}}{k_{zi}}\left(\frac{\epsilon\, k_{zi}}{2\kappa}\right)^2, \qquad (7.49)$$

elles sont très proches du résultat de l'approximation de BORN (7.42).

Notons que l'image du miroir effectif suggère que la réflexion de l'onde atomique ait lieu de façon instantanée sur la surface $\zeta_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{BKW}}(x)$. Ce modèle ignore donc l'épaisseur du réseau de diffraction. Dans le paragraphe suivant, nous verrons que c'est précisément l'épaisseur non nulle du réseau qui fait apparaître le facteur d'obliquité dans les populations (7.40).

7.3.3 Influence du facteur d'obliquité

Coupure du transfert de vecteur d'onde

Rappelons que le facteur d'obliquité $\beta(\xi)$ décroît exponentiellement pour de grandes valeurs de l'argument $\xi = \Delta k_{z,\pm 1}/\kappa$ [voir le comportement asymptotique (6.15)]. Ceci implique que les populations $w_{\pm 1}$ deviennent négligeables lorsque le transfert de vecteur d'onde $\Delta k_{z,\pm 1}$ augmente au-delà d'une valeur limite de l'ordre de la constante de décroissance κ de l'onde évanescente :

$$|\Delta k_{z,\pm 1}| \gg \kappa \; : \qquad w_{\pm 1} \propto \exp\left(-\frac{\pi |\Delta k_{z,\pm 1}|}{\kappa} \right). \tag{7.50}$$

Les populations des premiers ordres de diffraction ne sont donc notablement différentes de zéro que si le transfert normal de vecteur d'onde satisfait à la condition suivante :

$$|\Delta k_{z,\pm 1}| \lesssim \kappa. \tag{7.51}$$

Pour interpréter cette limitation de l'efficacité de diffraction, nous rappelons que dans la diffraction, l'onde atomique absorbe un vecteur d'onde du réseau réciproque du potentiel dipolaire de l'onde évanescente stationnaire. Dans la direction horizontale, ceci se traduit par les transferts discrets $\pm 2q$ parce que le potentiel est périodique et que son réseau réciproque ne contient que les composantes de FOURIER $\pm 2q$. Dans la direction verticale, le potentiel a une étendue de l'ordre de $1/\kappa$, et son développement en ondes planes est limité à des vecteurs d'ondes de l'ordre de κ. Par conséquent, il ne peut fournir à l'onde atomique un vecteur d'onde vertical qui soit supérieur à la constante de décroissance κ de l'onde évanescente.[10]

La condition (7.51) caractérise les situations dans lesquelles la diffraction est efficace. Notons qu'elle exprime un résultat de la théorie dynamique (la limite de l'efficacité de la diffraction) en termes d'une quantité de la théorie cinématique (le transfert de vecteur d'onde vertical $\Delta k_{z,\pm 1}$). Dans le diagramme d'EWALD (voir les figures 7.10 et 7.11), nous pouvons représenter la coupure (7.51) de l'efficacité de la diffraction par une bande horizontale de largeur verticale $\sim 2\kappa$ centrée autour du vecteur d'onde (k_{xi}, k_{zi}) de l'ordre spéculaire. Les populations non spéculaires de la figure de diffraction sont notables seulement si les vecteurs d'ondes diffractés $(k_{x,\pm 1}, k_{z,\pm 1})$ se trouvent à l'intérieur de cette « bande du couplage efficace ». Dans les paragraphes suivants, nous étudions les conséquences de cette coupure d'abord en incidence normale et ensuite en fonction de l'angle d'incidence.

Incidence normale

En incidence normale, nous distinguons entre deux régimes qui sont représentés sur les figures 7.10 et 7.11, respectivement.

[10] Cet argument n'est pas en contradiction avec la réflexion d'atomes ayant une vitesse incidente bien plus grande que $\hbar\kappa/M$ par l'onde évanescente parce qu'il est un argument perturbatif, alors que la réflexion est un effet non perturbatif.

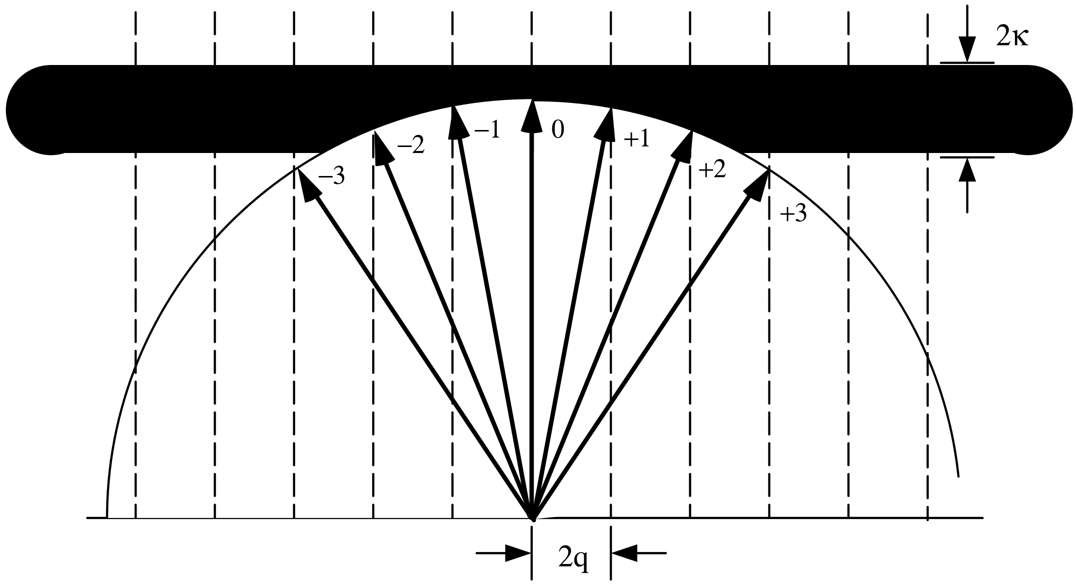

Figure 7.10: Bande de couplage efficace large : régime de RAMAN–NATH *(7.52).*

Le régime de RAMAN–NATH**.** Sur la figure 7.10, plusieurs ordres diffractés se trouvent à l'intérieur de la bande du couplage efficace. Comme le transfert normal de vecteur d'onde (7.41) pour les ordres premiers vaut approximativement $\Delta k_{z,\pm 1} = -2q^2/k_{zi}$ en incidence normale, ce régime est caractérisé par la condition

$$\frac{2q^2}{\kappa k_{zi}} \ll 1. \tag{7.52}$$

Le facteur d'obliquité β dans (7.40) est donc proche de l'unité et les populations des ordres de diffraction $n = \pm 1$ sont données par l'estimation (7.42) du paragraphe précédent. Nous notons que la condition (7.52) est satisfaite dans le cas générique où q et κ sont du même ordre de grandeur, à cause de la limite semi-classique. Par analogie avec la diffraction par une onde stationnaire en transmission, nous appelerons le régime (7.52) celui de RAMAN–NATH.

Le régime de BRAGG**.** La figure 7.11 représente le régime opposé : la bande de couplage efficace est étroite à l'échelle des transferts de vecteur d'onde. La diffraction est alors peu efficace en incidence normale. Ce régime est caractérisé par la condition opposée de (7.52) :

$$\frac{2q^2}{\kappa k_{zi}} \gtrsim 1. \tag{7.53}$$

Pour le réaliser dans la limite semi-classique, il faut satisfaire l'inégalité $q \gg \kappa$. L'épaisseur $1/\kappa$ du réseau de diffraction est alors beaucoup plus grande que sa période π/q. Ce régime est complémentaire du modèle du miroir effectif modulé parce que l'épaisseur non nulle du réseau implique une modification importante des populations

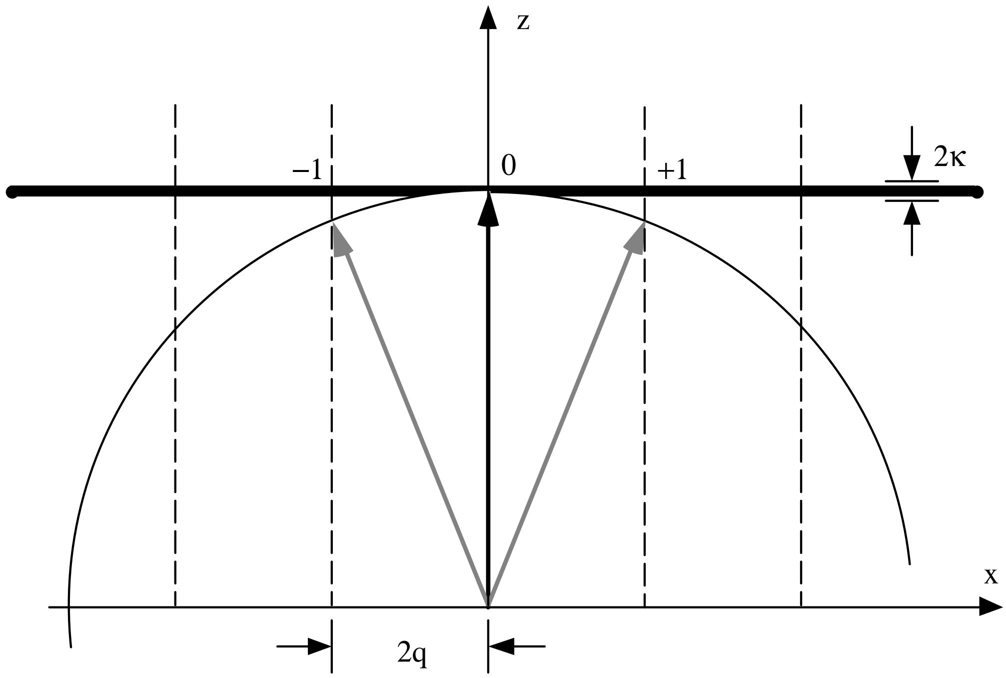

Figure 7.11: Bande de couplage efficace étroite : régime de BRAGG *(7.53).*

non spéculaires par rapport au résultat (7.49). Nous appelerons ce régime celui de BRAGG.

Incidence oblique

Nous distinguons de nouveau entre les régimes de RAMAN–NATH et de BRAGG parce que les populations des ordres de diffraction y présentent des comportements différents en fonction de l'angle d'incidence θ_i.

Le régime de RAMAN–NATH**.** Sur la figure 7.12, nous présentons les populations des ordres de diffraction $n = \pm 1$, données par l'expression (7.40) que nous avons trouvée dans le régime semi-classique, en fonction de l'angle d'incidence θ_i dans le plan du réseau xOz. Nous constatons que les populations des ordres $n = +1$ et $n = -1$ (les courbes en trait plein et en tirets) sont proches l'une de l'autre et qu'elles décroissent vers zéro lorsque l'angle d'incidence augmente. En particulier, elles décroissent plus vite que l'estimation (7.49) du modèle du miroir effectif ondulé où le facteur d'obliquité n'est pas pris en compte (les courbes en pointillées).

Pour interpréter ce comportement, étudions le diagramme d'EWALD représenté sur la figure 7.13. Nous rappelons que dans le régime de RAMAN–NATH, la bande du couplage efficace est large devant les différences des composantes normales des vecteurs d'onde diffractés. Nous pouvons alors approximer le cercle de conservation

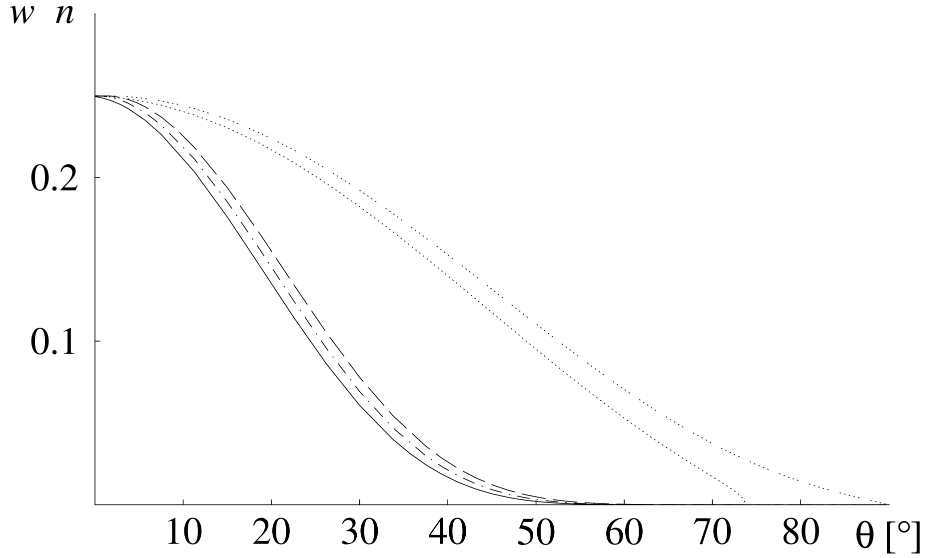

Figure 7.12: Populations (7.40) de la figure de diffraction dans le régime de RAMAN–NATH*, en fonction de l'angle d'incidence θ_i dans le plan du réseau xOz (en degrés). Trait plein : ordre $n = +1$, tirets : ordre $n = -1$. Point-tirets : approximation (7.56) dans le régime de* RAMAN–NATH*. Pointillées : résultat (7.49) du modèle du miroir effectif modulé qui ne tient pas compte du facteur d'obliquité.*
Paramètres : $k_i = 50\,q$, $\kappa = q$, $\epsilon = 0.02$. Le paramètre du critère (7.52) vaut $2q^2/\kappa k_i = 0.04$.

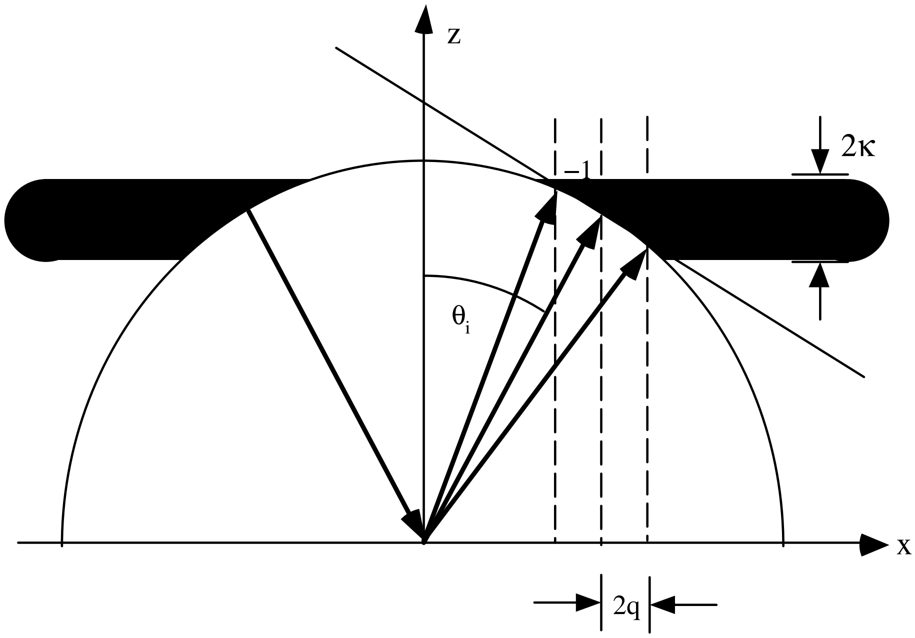

Figure 7.13: Bande de couplage efficace dans le régime de RAMAN–NATH *en incidence oblique.*

d'énergie par sa tangente à la position du vecteur d'onde spéculaire. Les transferts normaux de vecteur d'onde (7.41) sont alors donnés par

$$\Delta k_{z,\pm 1} \approx \mp 2q \tan\theta_i. \tag{7.54}$$

Cette approximation montre que $\Delta k_{z,\pm 1}$ augmente avec l'angle d'incidence. Le facteur d'obliquité β dans (7.40) fait alors décroître l'efficacité de la diffraction lorsque l'on s'éloigne de l'incidence normale.[11] La coupure (7.51) pour $\Delta k_{z,\pm 1}$ implique que la diffraction est efficace dans une plage d'angles d'incidence donnée par

$$\frac{q}{\kappa} \tan\theta_i \lesssim \frac{1}{2}. \tag{7.55}$$

Cette plage est grande dans le cas générique où q et κ sont du même ordre de grandeur. Nous l'appelerons l'*incidence oblique*. Pour les paramètres de la figure 7.12, l'estimation (7.55) donne la limite $\theta_i \lesssim 27°$, et nous constatons qu'au-delà de cet angle, les populations non spéculaires deviennent négligeables.

L'approximation (7.54) pour $\Delta k_{z,\pm 1}$ montre également que les transferts normaux de vecteur d'onde pour les ordres $n = +1$ et $n = -1$ diffèrent seulement par leur signe. Le facteur d'obliquité $\beta(\Delta k_{z,\pm 1}/\kappa)$ prend donc la même valeur pour ces deux

[11]Notons que dans l'approximation (7.54), le facteur d'obliquité est identique à celui que nous avons trouvé pour le mouvement classique, $\beta(\xi)$, avec $\xi = 2q \tan\theta_i/\kappa$ [voir (6.12, 6.13)].

ordres. En nous plaçant en incidence oblique et en négligeant des petites corrections de l'ordre de κ/k_{zi}, les populations (7.40) peuvent alors être approximées par

$$w_{\pm 1}^{(\mathrm{RN})} \approx \left(\frac{\epsilon k_{zi}}{2\kappa}\right)^2 \beta^2 \Big(2\frac{q}{\kappa}\tan\theta_i\Big). \tag{7.56}$$

La figure de diffraction est donc symétrique dans le régime de RAMAN–NATH. Le résultat (7.56) est représenté par la courbe en points-tirets sur la figure 7.12, et en comparant à l'approximation de BORN (les courbes en trait plein et en tirets), nous constatons qu'il est une bonne approximation de la figure de diffraction.

Calculons finalement un critère de validité quantitatif pour le régime de RAMAN–NATH en incidence oblique. A cet effet, nous approximons le cercle de la conservation d'énergie dans le diagramme d'EWALD (figure 7.13) non pas par une droite, mais par une parabole. On trouve alors l'expression suivante pour les transferts de vecteur d'onde

$$\Delta k_{z,\pm 1} \approx \mp 2q\tan\theta_i - \frac{2q^2}{k_{zi}}\frac{1}{\cos^2\theta_i}. \tag{7.57}$$

L'approximation précédente (7.54) correspond au premier terme de ce développement. Nous pouvons nous en contenter si le deuxième terme est petit par rapport à l'échelle caractéristique κ de la coupure de l'efficacité de diffraction. Ainsi trouvons-nous la condition suivante :

$$\frac{2q^2}{\kappa k_{zi}}\frac{1}{\cos^2\theta_i} \ll 1. \tag{7.58}$$

Si nous nous limitons à l'incidence oblique (7.55), cette condition est équivalente à celle pour l'incidence normale (7.52) parce que le facteur $1/\cos^2\theta_i$ y est de l'ordre de l'unité :

$$\frac{1}{\cos^2\theta_i} = 1 + \tan^2\theta_i \lesssim 1 + \frac{\kappa^2}{4q^2}. \tag{7.59}$$

En incidence rasante par contre, nous avons $\cos\theta_i \to 0$, et la condition (7.58) est violée. L'approximation linéaire pour le transfert de vecteur d'onde n'est donc plus valable. Nous allons étudier ce cas à la fin du paragraphe, en revenant au résultat (7.40) de l'approximation de BORN.

Le régime de BRAGG. Sur la figure 7.14, nous montrons les populations (7.40) des ordres de diffraction en fonction de l'angle d'incidence θ_i, pour un vecteur d'onde incident et un réseau tels que la condition (7.53) du régime de BRAGG est satisfaite. Par rapport au régime de RAMAN–NATH (la figure 7.12), nous constatons que les populations des ordres $n = +1$ et $n = -1$ sont assez différentes, et qu'elles passent par un maximum à des angles d'incidence $\pm\theta_B$ non nuls. En outre, la diffraction devient rapidement inefficace lorsque l'angle d'incidence s'écarte de la normale.

Pour interpréter ce comportement, nous notons qu'au voisinage de l'incidence normale, les transferts de vecteur d'onde (7.41) peuvent être approximés par

$$\Delta k_{z,\pm 1} \approx \mp\frac{2q}{k_{zi}}\left(k_{xi} \pm q\right). \tag{7.60}$$

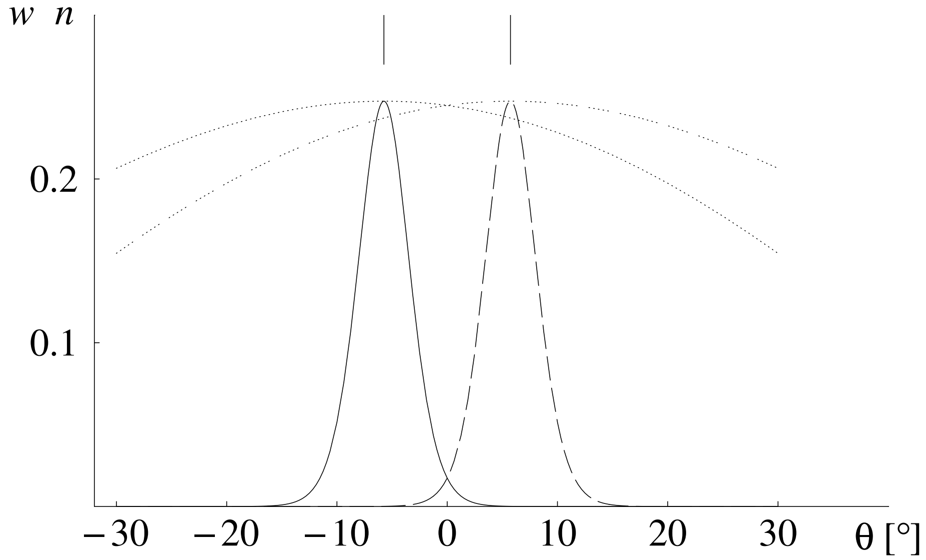

Figure 7.14: Populations (7.40) de la figure de diffraction dans le régime de BRAGG, *en fonction de l'angle d'incidence θ_i dans le plan du réseau xOz (en degrés). Trait plein : ordre $n = +1$, tirets : ordre $n = -1$, en pointillées : résultat (7.49) du modèle du miroir effectif modulé qui ne tient pas compte du facteur d'obliquité.*
Paramètres : $k_i = 10\,q$, $\kappa = 0.1\,q$, $\epsilon = 0.01$. Le paramètre de la condition (7.53) vaut $2q^2/\kappa k_i = 2$. La résonance de BRAGG *a lieu aux angles $\pm\theta_B \approx \pm 6°$ (les traits verticaux).*

A cause du facteur d'obliquité $\beta(\Delta k_{z,\pm 1}/\kappa)$, les populations non spéculaires sont maximales lorsque ces transferts s'annulent :

$$\Delta k_{z,\pm 1} = 0, \tag{7.61}$$

donc pour des vecteurs d'onde incidents tels que $k_{xi} = \pm q$. En fonction de la longueur d'onde atomique dans le plan xOz, $\lambda_{\mathrm{dB}} = 2\pi/k_i$, et de la période du réseau $a = \pi/q$, la condition (7.61) s'écrit encore sous la forme plus familière d'une condition de BRAGG,

$$\frac{a}{2}\sin\theta_B = \pm\lambda_{\mathrm{dB}}, \tag{7.62}$$

où θ_B est l'angle d'incidence au maximum. Nous appelerons ces géométries de diffraction des *résonances de* BRAGG. Dans le régime semi-classique, les angles de résonance θ_B donnés par (7.62) sont généralement proches de l'incidence normale.

Sur la figure 7.15, nous montrons la géométrie de diffraction à la résonance de BRAGG pour l'ordre $n = -1$. C'est alors la différence $\Delta k_{z,-1} = 0$ qui s'annule, et le vecteur d'onde incident est égal à $(q, -k_{zi})$. L'ordre de diffraction $n = -1$ correspond donc à un vecteur d'onde final $(-q, k_{zi})$, et cette onde diffractée se propage dans la direction inverse de l'onde incidente. A la résonance de BRAGG, la géométrie de diffraction à atomes correspond donc à un montage de type LITTROW.

Estimons maintenant la largeur de la résonance de BRAGG. En utilisant la limite (7.51) pour l'efficacité de diffraction et l'expression (7.60) pour les transferts de vecteur d'onde, on trouve que la diffraction vers l'ordre $n = -1$ est efficace tant que la composante horizontale k_{xi} du vecteur d'onde incident vérifie

$$q - \frac{\kappa k_{zi}}{2q} \lesssim k_{xi} \lesssim q + \frac{\kappa k_{zi}}{2q}. \tag{7.63}$$

En dehors de cet intervalle, le facteur d'obliquité $\beta(\Delta k_{z,-1}/\kappa)$ fait décroître la population w_{-1} vers zéro [voir la figure (7.14)]. Nous constatons donc que c'est précisément dans le régime de BRAGG $\kappa k_{zi}/(2q^2) \lesssim 1$ (7.53) que l'intervalle (7.63) est plus étroit que la séparation $2q$ entre les maximums des populations, comme c'est le cas sur la figure 7.14. Dans ce régime, les résonances de BRAGG sont nettement résolues.

Etant donné que les résonances de BRAGG ont lieu au voisinage de l'incidence normale, les populations des ordres de diffraction (7.40) autour des résonances peuvent être approximées par

$$w_{\pm 1} = \left(\frac{\epsilon k_{zi}}{2\kappa}\right)^2 \beta^2\left[2\frac{q}{\kappa}\left(\tan\theta_i \mp \frac{q}{k_{zi}}\right)\right]. \tag{7.64}$$

Pour les paramètres de la figure 7.14, cette approximation pour les populations $w_{\pm 1}$ se confond avec le résultat (7.40) de l'approximation de BORN. A la résonance pour l'ordre $n = -1$, le facteur d'obliquité β est égal à l'unité et la population w_{-1} dans (7.64) est donnée par l'estimation (7.42). Par contre, l'équation (7.64) montre que la population w_{+1} est alors réduite parce que l'argument de β vaut $4q^2/\kappa k_{zi} \gtrsim 1$.

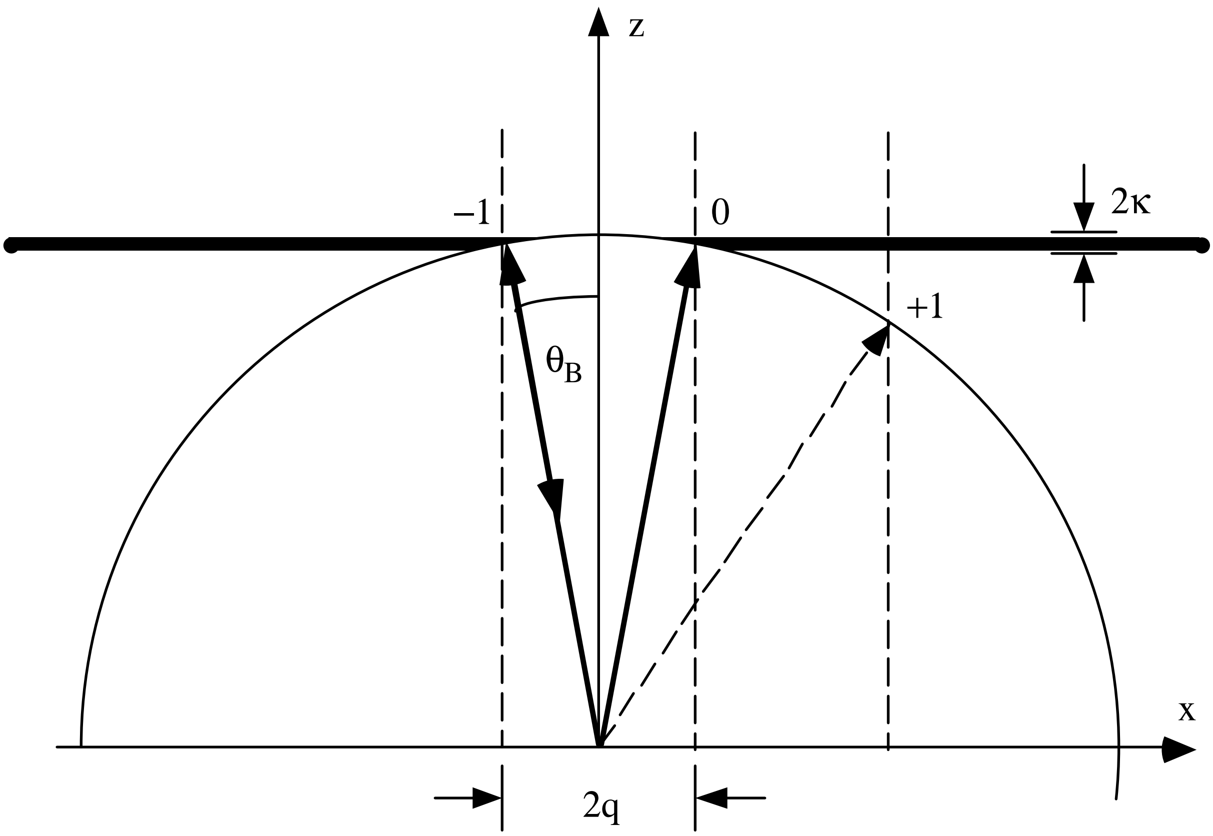

Figure 7.15: Diffraction d'atomes dans le régime de BRAGG. *Géométrie de* LITTROW *pour l'ordre* $n = -1$.

Pour observer expérimentalement la diffraction de BRAGG, il faut satisfaire à la condition (7.53). La vitesse incidente des atomes doit donc être faible :

$$v_{zi} \lesssim \left(\frac{q}{\kappa}\right)^2 \frac{2\hbar\kappa}{M}. \tag{7.65}$$

Pour qu'une telle vitesse corresponde encore au régime semi-classique, il est alors nécessaire que le rapport q/κ soit grand devant l'unité.[12] Il convient donc d'utiliser une onde évanescente avec une longueur de décroissance $1/\kappa$ beaucoup plus grande que la période du réseau. Ceci qui peut être réalisé par une réflexion totale interne près de l'angle limite. En effet, l'expression (7.63) montre que les résonances de BRAGG sont d'autant plus étroites que la constante de décroissance κ du réseau de diffraction est petite.

Comparons finalement le régime de BRAGG au régime du réseau géométriquement épais. Rappelons que nous avons identifié ce régime dans le contexte du mouvement classique et qu'il est caractérisé par le fait que l'atome oscille plusieurs fois dans une «vallée» du potentiel dipolaire de l'onde évanescente stationnaire pendant le temps d'interaction. Nous considérons à cet effet une situation où, à la résonance de BRAGG pour l'ordre $n = -1$, l'expression (7.64) pour la population w_{-1} devient de l'ordre de l'unité. Ceci correspond à une valeur du contraste de l'ordre de

$$\epsilon \sim \frac{2\kappa}{k_{zi}}, \tag{7.66}$$

et le calcul perturbatif n'est alors plus valable. Etant donné que la diffraction vers l'ordre $n = +1$ est beaucoup moins efficace, nous nous attendons à ce qu'une grande partie de la population de l'ordre spéculaire soit transférée vers l'ordre -1. En combinant (7.66) avec la condition du régime de BRAGG (7.53), nous trouvons que cette situation est équivalente au régime du réseau géométriquement épais (6.30) :

$$\epsilon\frac{q^2}{\kappa^2} = \left(\frac{\epsilon k_{zi}}{2\kappa}\right)\left(\frac{2q^2}{k_{zi}\kappa}\right) \gtrsim 1. \tag{7.67}$$

Le transfert de population vers l'ordre $n = -1$ à la résonance de BRAGG apparaît donc comme l'analogue quantique des oscillations classiques de l'atome dans les vallées du potentiel dipolaire. Pour calculer la figure de diffraction dans ce régime, l'approximation de BORN n'est plus suffisante. Nous étudierons ce problème dans le chapitre 9.

Incidence rasante

Nous avons déjà constaté que les populations des ordres de diffraction décroissent lorsque l'on s'éloigne de l'incidence normale (voir les figures 7.12 et 7.14). En nous

[12]Nous verrons au paragraphe 7.4 suivant que pour une vitesse incidente v_{zi} plus petite que la limite semi-classique $\hbar\kappa/M$, le facteur d'obliquité n'intervient plus dans les populations des ordres de diffraction.

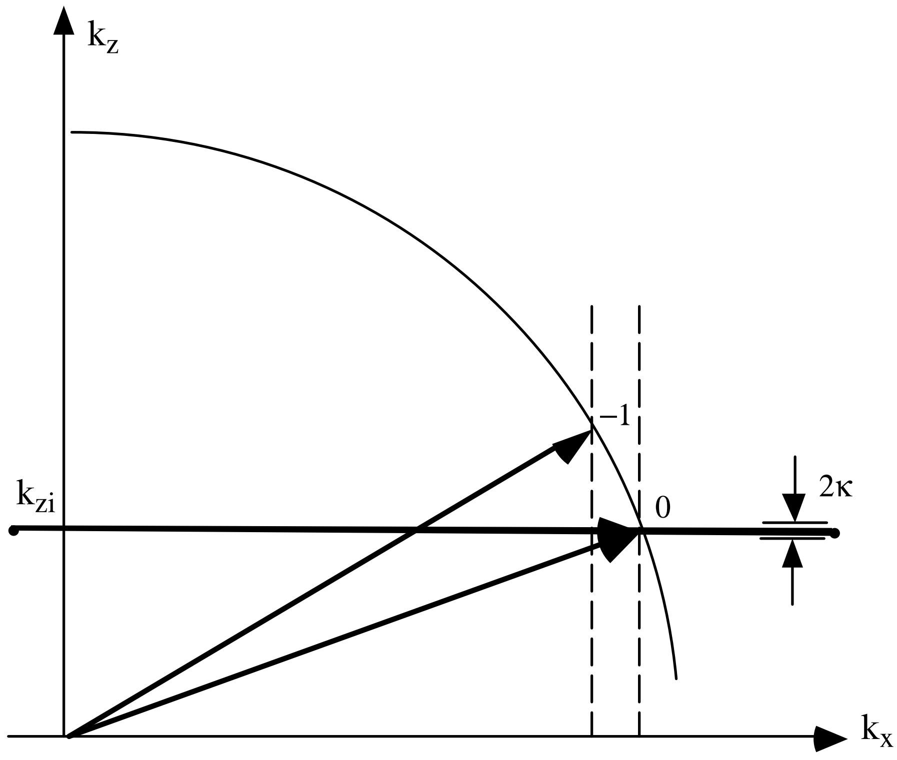

Figure 7.16: Bande de couplage efficace en incidence rasante.

plaçant maintenant en incidence rasante ($\theta_i \to 90°$), le diagramme d'EWALD de la figure 7.16 montre que la différence de vecteur d'onde $\Delta k_{z,-1}$ est du même ordre que le vecteur d'onde incident k_{zi}. Or, dans le régime semi-classique (qui est généralement réalisé dans les expériences de diffraction en incidence rasante [12, 13]), le vecteur d'onde incident k_{zi} est beaucoup plus grand que κ. Il s'ensuit que la population w_{-1} est proportionnelle à un facteur exponentiellement petit de l'ordre de $\exp(-\pi k_{zi}/\kappa)$ [voir (7.50)]. La diffraction est inefficace parce que le transfert de vecteur d'onde vertical est beaucoup plus grand que le vecteur d'onde maximal que puisse transférer le potentiel dipolaire. Nous concluons que les observations expérimentales de la diffraction d'atomes en incidence rasante [12, 13] ne peuvent pas être interprétées dans le cadre théorique que nous avons choisi ici. Nous étudierons dans le chapitre 11 un modèle plus complexe [78, 79, 81] qui permet d'expliquer la diffraction par des transitions entre états internes de l'atome auxquels sont associés des potentiels dipolaires différents.

7.3.4 Comparaison à la distribution classique de vitesse

La distribution de vitesse classique et la figure de diffraction sont schématisées sur la figure 7.17. Notons tout d'abord que les deux ont des allures assez différentes : la figure de diffraction contient des pics discrets situés aux transferts de vitesse $0, \pm 2\hbar q/M$; la distribution classique par contre, est une fonction continue avec une largeur caractérisée par le transfert de vitesse maximal $\Delta v_x^{\max}$.

Pour une comparaison plus précise, nous allons nous placer dans le régime de RAMAN–NATH (7.58). Nous supposons également que l'approximation de BORN est valable pour tous les angles d'incidence, ce qui correspond à la limite $\epsilon \ll 2\kappa/k_{zi}$ (7.43) pour le contraste du réseau. A l'inverse de l'estimation (7.67), ces deux conditions impliquent que le réseau de diffraction est géométriquement mince [voir (6.29)] :

$$\epsilon \frac{q^2}{\kappa^2} = \left(\frac{\epsilon k_{zi}}{2\kappa}\right)\left(\frac{2q^2}{k_{zi}\kappa}\right) \ll 1. \tag{7.68}$$

Nous pouvons donc comparer les populations (7.56) de la figure de diffraction à la distribution classique (6.26) que nous avons obtenue dans le régime du réseau géométriquement mince au chapitre 6.

On constate sur la figure 7.17 que la distribution classique est étroite par rapport à l'espacement entre les ordres de diffraction. Ceci est une conséquence du régime perturbatif : en effet, la demi-largeur (6.25) de la distribution de vitesse classique peut s'écrire sous la forme suivante

$$\Delta v_x^{\max} = 2\epsilon\, v_{zi}\, \frac{q}{\kappa}\beta(2q\tan\theta_i/\kappa) = 2\left(\frac{\epsilon k_{zi}}{2\kappa}\beta(2q\tan\theta_i/\kappa)\right)\frac{2\hbar q}{M}, \tag{7.69}$$

où le facteur en parenthèses est égal à la racine des populations $w_{\pm 1}^{(\mathrm{RN})}$ (7.56). Dans le

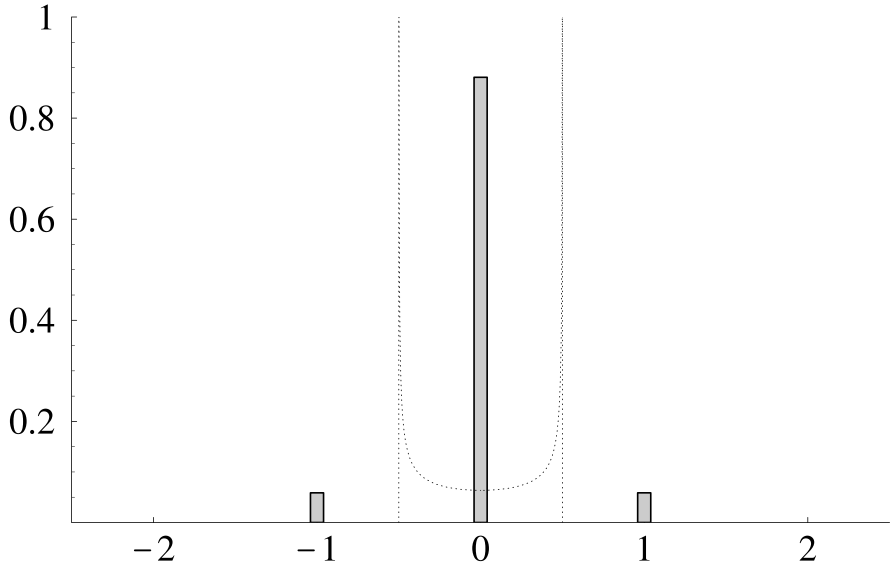

Figure 7.17: La distribution de vitesse classique (en pointillées) et la figure de diffraction dans le régime perturbatif.
Paramètres : mi-largeur de la distribution classique $\Delta v_x^{\max} = \hbar q/M$, populations non spéculaires $w_{\pm 1} = 1/16$.

régime perturbatif, il est petit devant l'unité ce qui implique

$$\Delta v_x^{\max} \ll \frac{4\hbar q}{M}. \tag{7.70}$$

Dans les deux distributions, la population atomique est donc repartie de deux façons tout à fait différentes : du point de vue classique, pratiquement tous les atomes subissent un transfert de vitesse non nul, bien que petit ; du point de vue quantique, par contre, seulement une petite fraction d'atomes sont diffractés dans les ordres non spéculaires, mais en subissant un grand transfert de vitesse.

Cependant, bien que les points de vue classique et quantique donnent des distributions de vitesse très différentes, l'on trouve des résultats identiques pour la valeur quadratique moyenne du transfert de vitesse : en effet, à partir de la distribution classique (6.26), on vérifie aisément que

$$\left\langle \Delta v_x^2 \right\rangle_{\rm cl} \equiv \int \mathrm{d}v_{xf}\, \rho(v_{xf})\, (v_{xf} - v_{xi})^2 = \tfrac{1}{2}\, (\Delta v_x^{\max})^2 . \tag{7.71}$$

Pour la distribution quantique, cette quantité est définie par

$$\left\langle \Delta v_x^2 \right\rangle_{\rm Born} \equiv (w_{+1} + w_{-1}) \left(\frac{2\hbar q}{M} \right)^2 , \tag{7.72}$$

et les populations (7.56) donnent le résultat

$$\left\langle \Delta v_x^2 \right\rangle_{\rm Born} = \tfrac{1}{2}\, (\Delta v_x^{\max})^2 , \tag{7.73}$$

ce qui est identique à (7.71). Par ailleurs, la distribution classique et la figure de diffraction sont toutes les deux symétriques de sorte que la valeur moyenne du transfert de vitesse s'annule.

Cette coïncidence est une illustration du «principe de correspondance» qui exprime que la mécanique quantique s'approche de la mécanique classique lorsque la longueur d'onde de DE BROGLIE devient petite par rapport aux échelles spatiales caractéristiques du potentiel. Nous avons effectivement fait cette hypothèse ici, en nous plaçant dans les régimes semi-classique ($1/k_{zi} \ll 1/\kappa$) et de RAMAN–NATH ($\kappa \sim q$).

Remarque. Notons néanmoins que ce n'est pas le transfert de vitesse classique pour une seule trajectoire qui coïncide avec la valeur moyenne quantique, mais un transfert de vitesse moyenné sur une distribution de trajectoires qui est uniforme sur une période du réseau. Physiquement, cette distribution correspond à la densité de probabilité spatialement uniforme de l'onde atomique incidente que nous supposons être une onde plane.

Grâce à la coïncidence entre les valeurs quadratiques moyennes classique (7.71) et quantique (7.73), on peut retrouver les populations des premiers ordres de diffraction sans recourir à l'approximation de BORN : il suffit de connaître la largeur $\Delta v_x^{\max}$ de la distribution de vitesse classique et le transfert de vitesse élémentaire $2\hbar q/M$ pour le réseau de diffraction, pour en déduire :

$$w_{\pm 1} \sim \frac{(\Delta v_x^{\max})^2}{4\,(2\hbar q/M)^2}. \tag{7.74}$$

Ce résultat montre encore que le régime perturbatif de diffraction est équivalent à une distribution de vitesse classique étroite à l'échelle du transfert de vitesse quantique $2\hbar q/M$.

7.4 Etude de la figure de diffraction dans la limite quantique

Dans le chapitre 3 de la première partie, nous avons trouvé qu'à la limite d'une longueur d'onde atomique très longue comparée à l'épaisseur de l'onde évanescente, l'on peut remplacer le potentiel dipolaire par une barrière de potentiel infinie. Dans le cas de l'onde évanescente stationnaire, nous nous attendons donc à ce que son potentiel dipolaire ressemble à une barrière de potentiel infinie dont la position est spatialement modulée. Le réseau de diffraction à atomes peut alors être rapproché d'un réseau de diffraction métallique de l'optique lumineuse.

7.4.1 Les populations des ordres de diffraction

En fonction des vecteurs d'ondes incident et diffracté, le régime quantique est caractérisé par la limite

$$k_{zi},\, k_{zn} \ll \kappa \tag{7.75}$$

qui est opposée à la limite semi-classique (7.37). Nous rappelons que les vecteurs d'onde diffractés (k_{xn}, k_{zn}) sont encore donnés par les expressions (7.4) et (7.5) de la théorie cinématique de la diffraction. Au paragraphe 7.4.2, nous étudierons les conditions cinématiques nécessaires pour réaliser le régime quantique.

Dans la limite quantique (7.75), l'approximation de BORN donne à partir de l'expression générale (7.34) le résultat suivant pour les populations des ordres de diffraction

$$w_n = \frac{\epsilon^2}{4} \frac{k_{zi} k_{zn}}{\kappa^2}, \qquad n = \pm 1. \tag{7.76}$$

On constate que cette expression est identique à celle (7.49) que nous avons trouvée à l'aide du modèle du miroir effectif modulé au paragraphe 7.3.2. Comme ce modèle suppose que l'atome est réfléchi de façon instantanée par le miroir effectif, nous avons donc là une indication pour l'existence d'une barrière de potentiel infinie qui permettrait d'interpréter la diffraction.

Plus précisément, nous pouvons refaire le raisonnement du paragraphe 7.3.2, en nous servant du miroir effectif du régime quantique : rappelons que pour l'onde évanescente simple et dans le régime quantique, le déphasage de l'onde atomique réfléchie est équivalent à une réflexion sur une barrière de potentiel infinie située à la position $\zeta_{\rm eff}^{\rm Schr}$ [donnée à (3.5)]. En généralisant cette idée au cas de l'onde évanescente stationnaire, nous trouvons un miroir effectif qui se trouve sur la surface

$$\zeta_{\rm eff}^{\rm Schr}(x) = \zeta_{\rm eff}^{\rm Schr} + \frac{1}{2\kappa} \ln\left(1 + \epsilon \cos 2qx\right). \tag{7.77}$$

A partir du déphasage

$$\Delta\varphi(x) = -2k_{zi}\zeta_{\rm eff}^{\rm Schr}(x) \tag{7.78}$$

de l'onde atomique réfléchie, le calcul du paragraphe 7.3.2 redonne alors l'expression (7.76) pour les populations de la figure de diffraction à l'ordre le plus bas en ϵ.

Nous notons que les populations non spéculaires (7.76) sont faibles devant l'unité parce qu'elles font intervenir deux petites quantités, le contraste ϵ ainsi que le rapport k_{zi}/κ [voir le régime quantique (7.75)]. Ceci suggère que nous pouvons effectuer un calcul perturbatif par rapport à un petit paramètre différent pour calculer la figure de diffraction même si le contraste est plus élevé. A cet effet, nous présentons au chapitre 10 l'approximation de RAYLEIGH qui permet d'étudier la diffraction d'une onde par une interface dont la hauteur varie peu à l'échelle de la longueur d'onde incidente. Cette hypothèse est en effet vérifiée dans le régime quantique, car (7.75) et (7.77) impliquent

$$k_{zi} \left| \zeta_{\rm eff}^{\rm Schr}(x) - \zeta_{\rm eff}^{\rm Schr} \right| \le \frac{k_{zi}}{2\kappa} \left| \log(1 - \epsilon) \right| \ll 1, \tag{7.79}$$

à moins que le contraste ϵ soit très proche de l'unité. Dans l'approximation de RAYLEIGH, l'on développera la fonction d'onde atomique par rapport au paramètre k_{zi}/κ, tout en gardant l'expression complète de la modulation du miroir effectif en fonction du contraste.

Notons finalement que l'approche de RAYLEIGH ne peut se généraliser au régime semi-classique parce qu'en remplaçant le réseau par une barrière de potentiel infinie, l'on ignorerait son épaisseur non nulle et donc la coupure du transfert de vecteur d'onde vertical.

7.4.2 Conditions cinématiques pour réaliser le régime quantique

Dans la limite quantique (7.75), la composante verticale de la vitesse incidente v_{zi} doit être faible par rapport à la vitesse $\hbar\kappa/M$. De plus, nous avons vu dans la construction d'EWALD (la figure 7.5) que le transfert de vitesse $2\hbar q/M$ du réseau doit être inférieur au module de la vitesse incidente, sinon la diffraction serait interdite par la conservation de l'énergie.

En incidence normale, ces conditions impliquent

$$q \ll \kappa, \tag{7.80}$$

et il faut utiliser un réseau de diffraction dont l'épaisseur $1/\kappa$ est beaucoup plus faible que la période π/q. Rappelons qu'un tel réseau peut être réalisé en faisant interférer deux ondes évanescentes qui se propagent presque dans la même direction (parallèle à la direction Oy).

Une possibilité alternative est de se placer en incidence rasante, à cause de la réduction de la composante verticale de la vitesse incidente. Or, si l'atome est incident dans le plan xOz, le vecteur d'onde diffracté dans l'ordre $n = -1$ vaut $k_{z,-1} \approx \sqrt{4qk_{xi}}$. Pour qu'il vérifie également la limite quantique (7.75), il faut donc satisfaire à la condition

$$\frac{q}{\kappa} \ll \frac{\kappa}{4k_{xi}}, \tag{7.81}$$

et comme le membre droit est généralement petit devant l'unité, cette condition est encore plus difficile à réaliser en incidence rasante que (7.80) en incidence normale. Cependant, si le plan d'incidence atomique est le plan yOz, l'on peut combiner la condition moins forte (7.80) et l'incidence rasante qui réduit la composante de vitesse perpendiculaire à la surface du réseau. L'atome se déplace alors presque dans le même plan que les faisceaux laser qui créent l'onde évanescente stationnaire (voir la figure 7.18).

7.4.3 Le régime «semi-quantique»

Nous notons que la diffraction d'atomes lents en incidence rasante permet de réaliser un régime «semi-quantique», où d'un côté, le vecteur d'onde incident k_{zi} est inférieur à κ et se trouve donc dans le régime quantique, et de l'autre côté, le vecteur d'onde diffracté dans l'ordre $n = -1$ est dans le régime semi-classique. A partir du résultat général de l'approximation de BORN (7.35), on obtient dans ce régime l'expression

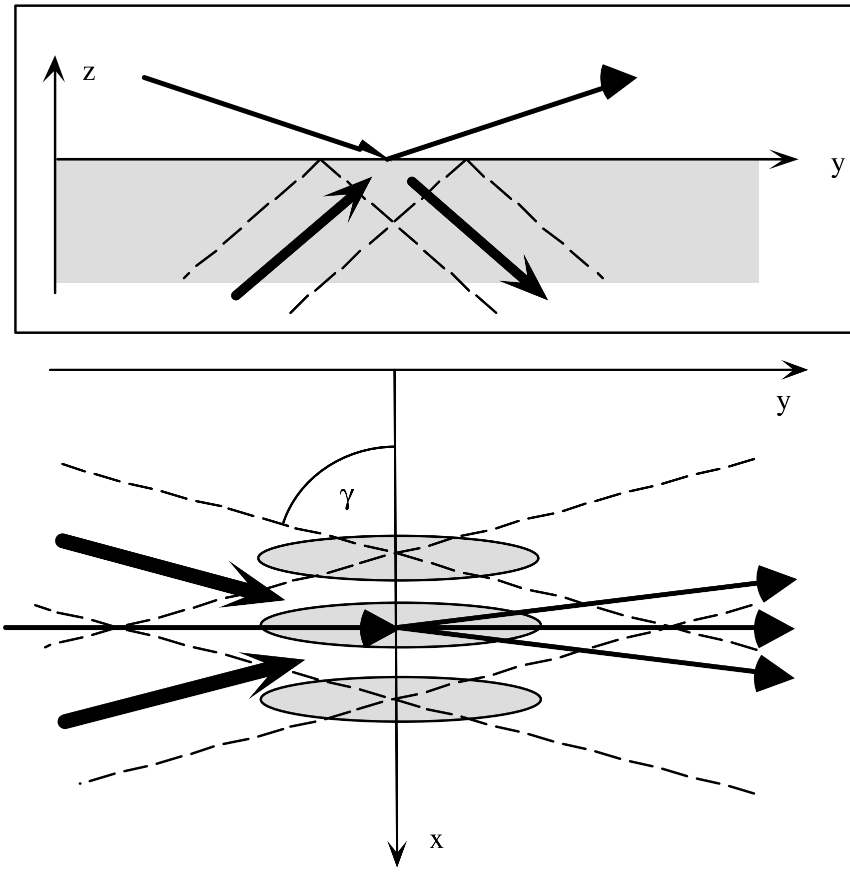

Figure 7.18: Schéma experimental pour réaliser la diffraction d'atomes dans le régime quantique. Le dessin dans l'encadré présente une vue du plan d'incidence des atomes yOz. Les flèches en trait épais représentent les faisceaux lumineux et celles en trait fin les faisceaux atomiques incident et diffractés.

suivante pour la population w_{-1}

$$\begin{aligned} & k_{zi} \ll \kappa \ll k_{z,-1} \; : \\ & w_{-1} = \frac{\epsilon^2\,\pi^3}{64} \frac{k_{zi}}{\kappa} \left(\frac{k_{z,-1}}{\kappa} \right)^4 \exp\left(-\frac{\pi k_{z,-1}}{\kappa} \right) \times \\ & \quad \times \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\pi k_{zi}}{2\kappa} \right)^2 - 2 \left(\frac{k_{zi}}{k_{z,-1}} \right)^2 + \mathcal{O}\Big[(k_{zi}/\kappa)^4,\, \mathrm{e}^{-\pi k_{z,-1}/\kappa} \Big] \right\}. \end{aligned} \tag{7.82}$$

L'exponentielle de la première ligne implique que la population diffractée décroît lorsque le vecteur d'onde $k_{z,-1}$ devient plus grand que la constante de décroissance κ de l'onde évanescente. Ceci correspond à la coupure du transfert de vecteur d'onde (7.51) du régime semi-classique, à ceci près que dans le régime semi-quantique, nous avons $\Delta k_{z,-1} = k_{z,-1} - k_{zi} \approx k_{z,-1}$.

Sur la figure 7.19, nous représentons les populations des ordres $n = \pm 1$, données par (7.34), en fonction de l'angle ϕ_i entre le plan d'incidence de l'atome et le plan xOz du réseau. L'angle d'incidence θ_i par rapport à la verticale est constant et choisi de façon à ce que la composante verticale du vecteur d'onde incident se trouve dans le régime quantique : $k_{zi} = |\mathbf{k}_i| \cos\theta_i \ll \kappa$. La composante horizontale du vecteur d'onde incident est donnée par $k_{xi} = |\mathbf{k}_i| \sin\theta_i \cos\phi_i$.

A $\phi_i = 0$, le plan d'incidence se confond avec le plan xOz et c'est cette situation qui réalise le régime semi-quantique. Lorsque ϕ_i augmente, le vecteur d'onde diffracté $k_{z,-1}$ diminue et à cause de l'exponentielle $\exp(-\pi k_{z,-1}/\kappa)$ dans l'expression (7.82), l'efficacité de diffraction augmente (la courbe en tirets). Lorsque ϕ_i augmente, $k_{z,-1}$ passe en-dessous de la limite κ, et l'on entre dans le régime quantique (voir les courbes en pointillées qui représentent les populations (7.76) dans le régime quantique). La population w_{-1} diminue de nouveau à cause du facteur $k_{z,-1}$ dans (7.76). Pour ces angles d'incidence, l'ordre de diffraction $n = +1$ est également permis par la conservation d'énergie (la courbe en trait plein).

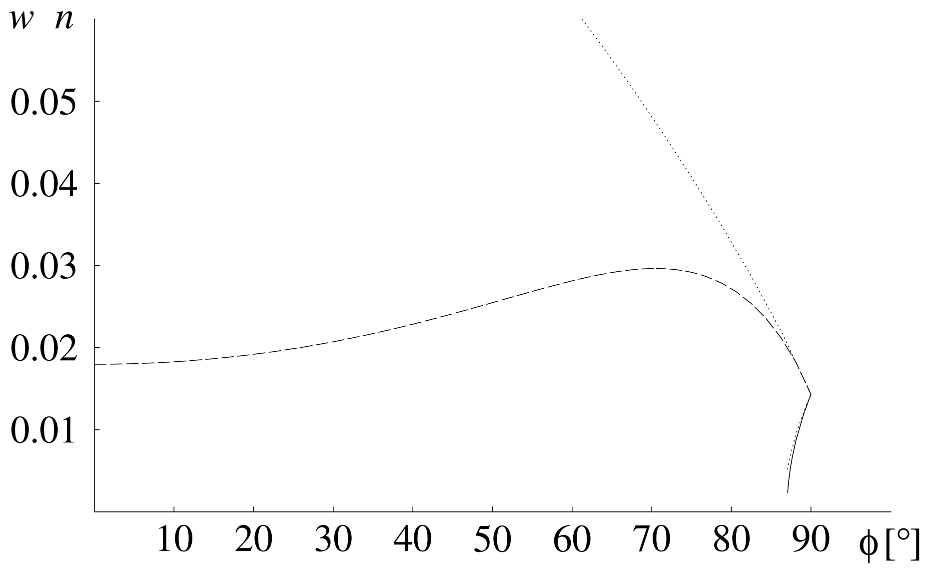

Figure 7.19: Populations des ordres de diffractions dans les régimes semi-quantique ($\phi_i \to 0°$) et quantique ($\phi_i \to 90°$), en fonction de l'angle ϕ_i (en degrés) entre le plan d'incidence atomique et le plan xOz. L'ordre $n = +1$ (en trait plein) apparaît pour ϕ_i proche de $90°$. Tirets : ordre $n = -1$, pointillées : expressions approchées (7.76) pour $w_{\pm 1}$ dans la limite quantique.
L'atome est incident avec un vecteur d'onde $|\mathbf{k}_i| = 10\,\kappa$, sous un angle $\theta_i \approx 87.°1$, de sorte que $k_{zi} = 0.5\,\kappa$. Le vecteur d'onde du réseau vaut $q = 0.1\,\kappa$ et le contraste $\epsilon = 0.5$. Pour $\phi_i = 0$, le vecteur d'onde diffracté dans l'ordre $n = -1$ vaut $k_{z,-1} \approx 2\kappa$. Le régime $k_{z,-1} \lesssim \kappa$ correspond à $\phi_i \gtrsim 79°$.

7.5 Conclusion et perspectives

L'approximation de BORN nous a permis d'identifier une coupure d'ordre dynamique pour l'efficacité de la diffraction d'atomes : dans la direction normale Oz, à la différence de la réflexion spéculaire, le potentiel du réseau de diffraction ne peut transférer un vecteur d'onde à l'atome qui soit très supérieur à la constante de décroissance κ de l'onde évanescente. Cette coupure permet d'évaluer l'efficacité de la diffraction en comparant le transfert limite κ aux différences verticales $\Delta k_{z,\pm 1}$ des vecteurs d'onde des ordres de diffraction. Elle implique en particulier que la diffraction devient inefficace en incidente rasante. Il semble donc difficile d'expliquer les observations expérimentales de la diffraction d'atomes en incidence rasante [12, 13] dans le cadre du modèle du potentiel dipolaire scalaire que nous avons choisi ici. Nous étudierons ce problème au chapitre 11 à l'aide d'un modèle plus complexe où intervient également la structure interne de l'atome.

Avant d'aborder ce modèle plus complexe, nous allons rester dans le cas scalaire et présenter trois approches qui permettent de dépasser le régime perturbatif auquel est restreinte l'approximation de BORN. En effet, nous avons pu établir dans ce chapitre une limite de validité pour l'approximation de BORN : il faut que le contraste ϵ de l'onde évanescente stationnaire soit inférieur au rapport κ/k_{zi} entre la longueur d'onde de DE BROGLIE de l'atome incident et l'épaisseur du réseau de diffraction. Une façon équivalente d'exprimer cette condition est que la position du miroir effectif associé au réseau de diffraction soit faiblement modulée à l'échelle de la longueur d'onde atomique incidente. Dans le régime semi-classique, où l'épaisseur du réseau est grande devant la longueur d'onde atomique, l'approximation de BORN n'est alors valable que pour des valeurs très petites du contraste.

Sur le schéma 7.20, nous représentons les différents régimes que nous avons identifiés jusqu'ici, ainsi que des directions possibles pour dépasser les limites de l'approximation de BORN. La condition de validité de l'approximation de BORN est représentée par la ligne horizontale du schéma 7.20. La ligne diagonale sépare les régimes du réseau géométriquement mince (au-dessus et à gauche) et épais que nous avons identifiés au chapitre 6. La partie gauche du schéma représente le régime de RAMAN–NATH où l'épaisseur de l'onde évanescente stationnaire est comparable ou plus petite que sa période [la condition (7.52)]. Dans la partie droite, le réseau est beaucoup plus épais, et l'on réalise alors le régime de BRAGG [la condition (7.53)].[13]

Sur le schéma (7.20), les flèches illustrent deux stratégies pour dépasser le régime perturbatif (dans la limite semi-classique) :

1. Nous avons constaté que si l'épaisseur et la période du réseau sont du même ordre de grandeur (le régime de RAMAN–NATH situé sur la partie gauche du

[13] Lorsque l'angle d'incidence augmente, la ligne verticale se déplace en direction de la région $q < \kappa$ à cause de la condition (7.58). Quant à la limite pour l'approximation de BORN, elle se déplace vers des valeurs plus grandes du contraste ϵ : à cause du facteur d'obliquité $\beta < 1$, un contraste plus élevé est nécessaire en incidence oblique pour créer une population non spéculaire donnée.

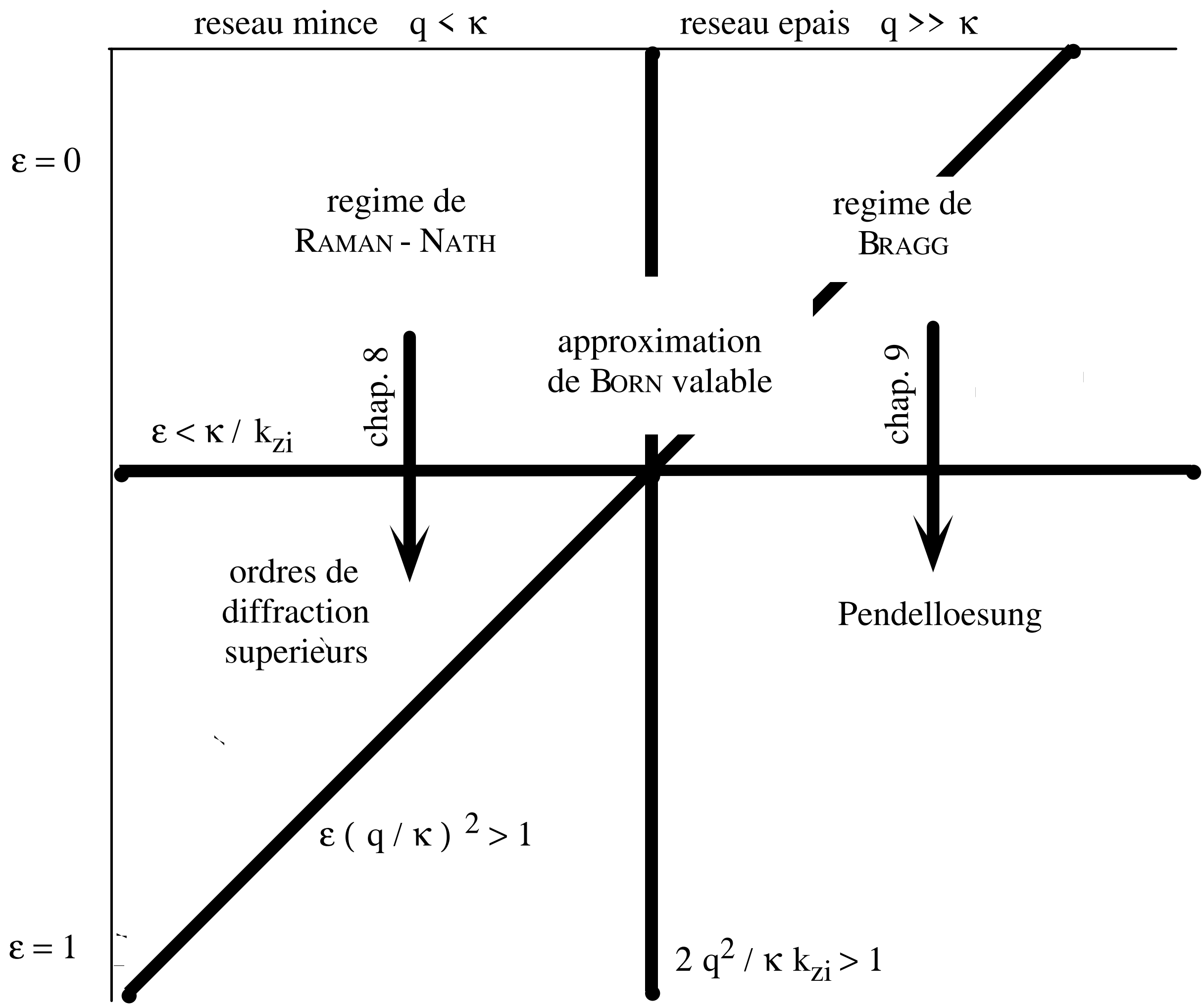

Figure 7.20: Représentation schématique des différents régimes en fonction du contraste ϵ de l'onde évanescente stationnaire et du rapport q/κ entre sa longueur de décroissance et sa période. Le schéma est esquissé pour l'incidence normale et dans le régime semi-classique.

schéma 7.20), la figure de diffraction présente des points communs avec la distribution de vitesse classique du régime du réseau géométriquement mince : les valeurs moyennes et quadratiques moyennes du transfert de vitesse sont les mêmes dans les deux points de vue. Si le contraste augmente au-delà du régime perturbatif, la distribution de vitesse classique devient plus large et couvre plusieurs ordres de diffraction. Nous nous attendons donc à ce que dans la figure de diffraction, des ordres supérieurs apparaissent et que l'enveloppe des populations des ordres soit donnée par la distribution de vitesse classique. L'on peut alors se demander si l'approche perturbative classique qui nous a permis de trouver la distribution de vitesse pour un réseau géométriquement mince, peut être utilisée aussi pour calculer la figure de diffraction. Nous répondrons à cette question par l'affirmative au chapitre 8 qui présente l'approximation du «réseau de phase mince». Dans le régime de RAMAN–NATH et pour un réseau géométriquement mince, cette approximation permet de décrire à la fois le régime perturbatif où l'approximation de BORN est valable, et une région de valeurs plus importantes du contraste ϵ, où plusieurs ordres sont peuplés dans la figure de diffraction.

2. Pour le cas d'un réseau épais (le régime de BRAGG sur la partie droite du schéma 7.20), nous avons constaté que les populations des ordres $n = \pm 1$ sont différentes. L'asymétrie maximale se produit à la résonance de BRAGG où deux ordres, $n = 0$ et $n = -1$, par exemple, ont des vecteurs d'onde dont les composantes normales sont les mêmes. Le vecteur d'onde diffracté de l'ordre $n = +1$ se trouve alors en-dehors de la bande de couplage efficace dans le diagramme d'EWALD, et la population w_{+1} est beaucoup plus faible que w_{-1}. Au-delà du régime perturbatif, nous nous attendons à ce que une grande partie de la population atomique soit transférée vers l'ordre -1. Il paraît alors justifié de se restreindre aux seuls ordres $n = 0, -1$ entre lesquels le couplage est maximal. C'est une telle approche (symbôlisée par la flèche à droite du schéma 7.20) que nous permet au chapitre 9 de mettre en évidence le phénomène de la *Pendellösung* (la «solution du pendule») dans la diffraction de BRAGG.

Finalement, l'approximation de BORN nous à également permis d'étudier la diffraction d'atomes dans le régime quantique, $k_{zn} \ll \kappa$, où la longueur d'onde de DE BROGLIE est beaucoup plus grande que la portée du potentiel. Dans ce régime, la coupure de l'efficacité de la diffraction n'est pas pertinente, étant donnée que les transferts de vecteur d'onde sont tous inférieurs à κ. Nous avons montré que la figure de diffraction atomique peut alors être interprétée par la réflexion sur une barrière de potentiel infinie dont la position présente une faible modulation spatiale. Ce modèle est analogue à la diffraction d'une onde lumineuse par un réseau de diffraction métallique. Cette analogie permet d'envisager une troisième stratégie pour calculer la figure de diffraction au-delà de la limite perturbative (voir le schéma 7.21) :

3. Dans le régime quantique, nous avons constaté que les ordres non spéculaires de la figure de diffraction restent faiblement peuplés, même si le contraste ϵ du

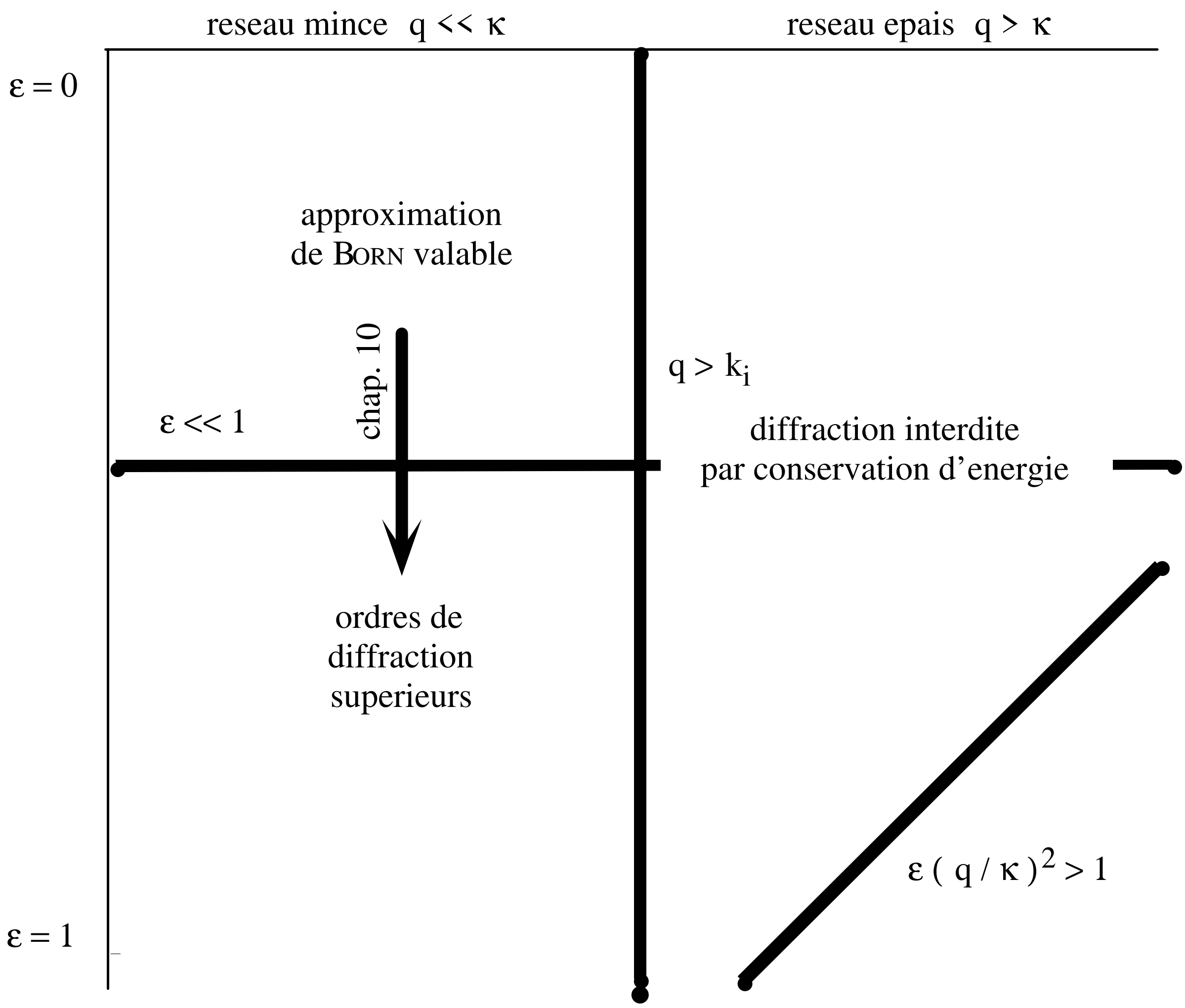

Figure 7.21: Représentation schématique analogue à la figure 7.20, mais pour le régime quantique.
A droite de la ligne verticale, les ordres non spéculaires sont interdits par la conservation de l'énergie. L'approximation de BORN *décrit la diffraction dans la partie supérieure du schéma parce qu'elle est limitée au premier ordre par rapport au contraste ϵ.*
L'approche de RAYLEIGH *(symbôlisée par la flèche) permet de couvrir le régime d'un contraste comparable à l'unité où les ordres $n = \pm 2, \pm 3, \dots$ apparaissent dans la figure de diffraction.*

réseau est de l'ordre de l'unité. Cette observation indique que le développement au premier ordre en ϵ, qui est à la base de l'approximation de BORN, n'est pas le choix optimal pour caractériser la diffraction d'atomes dans le régime quantique. Dans le chapitre 10, nous présentons une approche alternative inspirée par l'analogie au miroir métallique ondulé : en partant du modèle d'une barrière de potentiel infinie dont la position est modulée, nous nous servirons de la méthode de RAYLEIGH pour calculer la fonction d'onde, en supposant que la modulation de la barrière est faible devant la longueur d'onde incidente. Il se trouve que ce modèle n'est pas restreint à des valeurs faibles du contraste et permet d'obtenir des expressions approchées pour les populations des ordres supérieurs dans la figure de diffraction.

Annexe

7.A Calcul de la figure de diffraction à l'aide de la règle d'or de FERMI

Dans cette annexe, nous démontrons l'expression (7.34) pour les populations des ordres de diffraction à partir de la théorie de la diffusion quantique. Nous calculons une section efficace de diffusion à l'aide de la règle d'or de FERMI. Moyennant une normalisation par la surface du réseau, la section efficace permet d'obtenir les populations des ordres de diffraction.

7.A.1 La section efficace de diffusion

Du point de vue de la théorie quantique de diffusion, l'onde atomique est diffractée parce que la partie modulée du réseau de diffraction induit des transitions entre les états atomiques incident et final. En représentation position, ces états sont donnés par les fonctions d'ondes $\bar{\psi}_{if}(\mathbf{r})$, elles sont des fonctions propres du Hamiltonien $\mathcal{H}_0$ avec

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_{\max}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}, \tag{7.A.1}$$

qui décrit la partie non modulée du réseau. La transition de $\bar{\psi}_i(\mathbf{r})$ vers $\bar{\psi}_f(\mathbf{r})$ est alors caractérisée par une section efficace différentielle $\mathrm{d}\Sigma/\mathrm{d}\Omega_f$. Dans l'approximation de BORN[14], la section efficace est donnée par la règle d'or de FERMI :

$$\frac{\mathrm{d}\Sigma}{\mathrm{d}\Omega_f} = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{j_i}\left|\left\langle\bar{\psi}_f(\mathbf{r})\right| V^{(1)}(\mathbf{r})\left|\bar{\psi}_i(\mathbf{r})\right\rangle\right|^2 \frac{\mathrm{d}n_f}{\mathrm{d}E^{(3D)}\mathrm{d}\Omega_f}. \tag{7.A.2}$$

Dans cette expression, $\mathrm{d}\Omega_f$ est l'élément d'angle solide autour de la direction de l'onde atomique finale, j_i le courant de probabilité de l'onde atomique incidente, $V^{(1)}(\mathbf{r})$ la partie modulé du potentiel lumineux de l'onde évanescente stationnaire et $\mathrm{d}n_f/\mathrm{d}E^{(3D)}$ la densité d'états finaux pour l'énergie $E^{(3D)}$ de l'onde incidente. Les fonctions d'ondes $\bar{\psi}_{if}(\mathbf{r})$ sont normalisées de façon à représenter une densité de probabilité en trois dimensions.

7.A.2 Populations des ordres de diffraction

Avant de calculer explicitement la section efficace (7.A.2), nous montrons comment elle permet d'obtenir les populations des ordres de diffraction. A cet effet, nous normalisons la section efficace par la surface du réseau de diffraction. Cette procédure est

[14]Plus précisément, l'approximation (7.A.2) pour la section efficace s'appelle « approximation de BORN à partir d'ondes modifiées » (*distorted wave Born approximation*) parce que les états initial et final ne sont pas des ondes planes (comme pour un potentiel diffuseur localisé en trois dimensions), mais tiennent déjà compte de la réflexion sur le potentiel non modulé du Hamiltonien $\mathcal{H}_0$.

nécessaire parce que, à la différence d'un potentiel diffuseur localisé dans l'espace, nous avons affaire à un réseau de diffraction qui s'étend sur un plan infini.

Probabilité différentielle de diffraction

Nous définissons d'abord une probabilité différentielle de diffraction $\mathrm{d}w/\mathrm{d}\Omega_f$. A cet effet, nous divisons le nombre d'atomes diffractés par unité de temps par le nombre d'atomes incidents par unité de temps. Par la définition même de la section efficace, le nombre d'atomes diffractés par unité de temps est donné par

$$\frac{\mathrm{d}N_{\text{diff}}}{\mathrm{d}t} = j_i \frac{\mathrm{d}\Sigma}{\mathrm{d}\Omega_f}, \tag{7.A.3}$$

où j_i est le courant de probabilité incident. Le nombre d'atomes incidents est infini si nous considérons un réseau de diffraction qui s'étend sur tout le plan xOy. Nous limitons donc le réseau à une aire L^2 finie de sorte que le nombre d'atomes incidents vaut

$$\frac{\mathrm{d}N_{\text{inc}}}{\mathrm{d}t} = j_i L^2 \cos\theta_i. \tag{7.A.4}$$

Le facteur $\cos\theta_i$ dans cette expression est la projection de la normale à la surface xOy sur la direction de l'onde incidente. Il tient compte de l'effet de perspective qui réduit la surface du réseau lorsque les atomes sont incidents sous un angle différent de la normale.

En divisant (7.A.3) par (7.A.4), nous obtenons la probabilité différentielle de diffraction qui est donc donnée par

$$\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\Omega_f} = \frac{1}{L^2\cos\theta_i}\frac{\mathrm{d}\Sigma}{\mathrm{d}\Omega_f}. \tag{7.A.5}$$

Nous notons qu'elle peut être interprétée comme une « section efficace par unité de surface du réseau ».

Poids des pics de diffraction

Nous notons maintenant qu'en fonction de la direction de l'onde finale, la probabilité différentielle $\mathrm{d}w/\mathrm{d}\Omega_f$ est piquée aux angles de diffraction (θ_n, φ_n). De façon équivalente, nous pouvons considérer une probabilité de diffusion par unité de vecteur d'onde final[15] $\mathrm{d}w/\mathrm{d}k_{xf}\mathrm{d}k_{yf}$. Le changement de variable $(\theta_f, \varphi_f) \to (k_{xf}, k_{yf})$

[15] Elle ne contient pas de différentielle $\mathrm{d}k_{zf}$ parce que la composante normale k_{zf} du vecteur d'onde final est fixée par la conservation de l'énergie :

$$k_{zf} = \sqrt{\left(k^{(3D)}\right)^2 - k_{xf}^2 - k_{yf}^2}.$$

implique le Jacobien

$$\begin{aligned} \mathrm{d}k_{xf}\,\mathrm{d}k_{yf} &= K_f\,\mathrm{d}K_f\,\mathrm{d}\varphi_f \\ &= (k^{(3D)})^2 \sin\theta_f \cos\theta_f\,\mathrm{d}\theta_f\,\mathrm{d}\varphi_f \\ &= k^{(3D)} k_{zf}\mathrm{d}\Omega_f, \end{aligned} \tag{7.A.6}$$

où nous avons utilisé la quantité $K_f = (k_{xf}^2 + k_{yf}^2)^{1/2} = k^{(3D)} \sin\theta_f$ et le module de vecteur d'onde

$$k^{(3D)} = \sqrt{\frac{2ME^{(3D)}}{\hbar^2}}. \tag{7.A.7}$$

La relation (7.A.6) permet d'exprimer $\mathrm{d}w/\mathrm{d}k_{xf}\mathrm{d}k_{yf}$ en fonction de $\mathrm{d}w/\mathrm{d}\Omega_f$:

$$\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}k_{xf}\mathrm{d}k_{yf}} = \frac{1}{k^{(3D)}k_{zf}}\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\Omega_f}. \tag{7.A.8}$$

Cette probabilité différentielle est piquée aux vecteurs d'onde diffractés (k_{xn}, k_{yn}) et nous pouvons alors identifier les populations w_n des ordres avec les poids des pics de diffraction :

$$\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}k_{xf}\,\mathrm{d}k_{yf}} = \sum_n w_n\,\delta(k_{xf} - k_{xn})\,\delta(k_{yf} - k_{yn})\,. \tag{7.A.9}$$

7.A.3 Calcul explicite de la section efficace

Pour calculer la section efficace de diffusion (7.A.2), il est nécessaire d'introduire une boîte de quantification pour normaliser les fonctions d'onde $\bar{\psi}_{if}(\mathbf{r})$. Nous considérons une boîte cubique de volume L^3 dont la base coïncide avec la surface L^2 du réseau de diffraction. Son arête L est choisie beaucoup plus grande que la période et la longueur de décroissance du réseau de diffraction. Dans les directions Ox et Oy, nous choisissons des conditions aux limites périodiques ; au plan $z = L$, la boîte est fermée par une barrière de potentiel infinie.

Normalisation des états initial et final

Comme le potentiel du Hamiltonien (7.A.1) ne dépend que de la coordonnée normale z, les états $\bar{\psi}_{if}(\mathbf{r})$ sont de la forme

$$\bar{\psi}_{if}(\mathbf{r}) = C \exp \mathrm{i}\,(k_{x,if}x + k_{y,if}y)\,\phi_{k_{z,if}}(z)\,, \tag{7.A.10}$$

où la constante de normalisation C est déterminée par le comportement asymptotique de la fonction d'onde à une dimension $\phi_{k_{z,if}}(z)$ dans la région $z \to +\infty$ [voir (7.23)] :

$$z \to +\infty \ : \qquad \phi_{if}(\mathbf{r}) = \sin\left[k_{z,if}z + \tfrac{1}{2}\Delta\varphi(k_{z,if})\right]. \tag{7.A.11}$$

En imposant que la probabilité de présence de l'atome dans la boîte vaille l'unité, l'on trouve

$$C = \sqrt{\frac{2}{L^3}}. \tag{7.A.12}$$

Nous pouvons maintenant écrire le courant de probabilité incident et la densité d'états finaux. Le courant j_i de l'onde incidente dans la fonction d'onde $\bar{\psi}_i(\mathbf{r})$ (7.A.10) vaut

$$j_i = \frac{\hbar k^{(3D)}}{M}\frac{C^2}{4} = \frac{\hbar k^{(3D)}}{2ML^3}. \tag{7.A.13}$$

Pour calculer la densité d'états, nous observons que dans la boîte de quantification, les vecteurs d'onde finaux $\mathbf{k}_f$ sont discrétisés avec des espacements

$$\delta k_x = \delta k_y = \frac{2\pi}{L} \quad \text{et} \quad \delta k_z = \frac{\pi}{L}. \tag{7.A.14}$$

La densité d'états vaut alors

$$\frac{\mathrm{d}n_f}{\mathrm{d}E^{(3D)}} = \frac{1}{\delta k_x\,\delta k_y\,\delta k_z}\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}_f}{\mathrm{d}E^{(3D)}} = \frac{L^3}{4\pi^3}\frac{Mk^{(3D)}}{\hbar^2}\mathrm{d}\Omega_f. \tag{7.A.15}$$

Résultat pour la section efficace différentielle

Rappelons que la partie modulée du potentiel est donnée par

$$V^{(1)}(\mathbf{r}) = \epsilon\, V_{\max}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}\cos 2qx. \tag{7.A.16}$$

Dans la règle d'or de FERMI, nous avons à calculer son élément de matrice

$$\left\langle \bar{\psi}_f(\mathbf{r})\right| V^{(1)}(\mathbf{r}) \left|\bar{\psi}_i(\mathbf{r})\right\rangle \equiv \int \mathrm{d}\mathbf{r}\,\bar{\psi}_f^*(\mathbf{r})\,V^{(1)}(\mathbf{r})\,\bar{\psi}_i(\mathbf{r}). \tag{7.A.17}$$

Si nous étendons l'intégrale sur tout l'espace, les intégrations sur les coordonnées x et y font apparaître des fonctions δ localisées aux vecteurs d'onde diffractés au premier ordre :

$$\begin{aligned}\left\langle \bar{\psi}_f(\mathbf{r})\right| V^{(1)}(\mathbf{r}) \left|\bar{\psi}_i(\mathbf{r})\right\rangle &= \frac{4\pi^2\epsilon}{L^3}\,\delta(k_{yf}-k_{yi}) \times \\ &\times \sum_{n=\pm1}\delta(k_{xf}-k_{xn})\,\langle\phi_{k_{zn}}(z)|\,V_{\max}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}\,|\phi_{k_{zi}}(z)\rangle\,,\end{aligned} \tag{7.A.18}$$

où le dernier élément de matrice représente l'intégration sur la coordonnée z. Pour calculer le carré du résultat (7.A.18), nous nous servons de la boîte de quantification qui permet de régulariser les carrés des fonctions δ de la façon suivante

$$|\delta(k_{xf}-k_{xn})|^2 \simeq \frac{L}{2\pi}\delta(k_{xf}-k_{xn}). \tag{7.A.19}$$

En utilisant le flux incident (7.A.13) et la densité d'états (7.A.15), la section efficace différentielle (7.A.2) donne alors le résultat

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\Sigma}{\mathrm{d}\Omega_f} &= L^2\frac{4\,\epsilon^2M^2k^{(3D)}}{\hbar^4}\delta(k_{yf}-k_{yi}) \times \\ &\times \sum_{n=\pm1}\delta(k_{xf}-k_{xn})\left|\langle\phi_{k_{zn}}(z)|\,V_{\max}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}\,|\phi_{k_{zi}}(z)\rangle\right|^2.\end{aligned} \tag{7.A.20}$$

Nous constatons que cette section efficace est proportionnelle à l'aire L^2 du réseau de diffraction et qu'elle est une somme de pics localisés aux vecteurs d'onde diffractés au premier ordre.

Résultat pour les populations des ordres

En utilisant la normalisation (7.A.5), le changement de variable (7.A.6) et la définition (7.A.9) des populations des ordres de diffraction, la section efficace différentielle (7.A.20) implique que les populations des ordres de diffraction au premier ordre sont données par

$$w_n = \frac{4\epsilon^2 M^2}{\hbar^4 k_{zi} k_{zn}} \left| \langle \phi_{k_{zn}} | \, V_{\max} \, \mathrm{e}^{-2\kappa z} \, | \phi_{k_{zi}} \rangle \right|^2, \qquad n = \pm 1. \tag{7.A.21}$$

Nous constatons que cette expression est identique au résultat (7.34) que nous avons obtenu au paragraphe 7.

7.B Fonction de GREEN pour le potentiel exponentiel

Nous donnons ici la démonstration de l'expression (7.30) pour la fonction de GREEN du potentiel exponentiel. Au cours de cette démonstration, nous établissons le comportement asymptotique (7.B.32) de la fonction de GREEN. Nous calculons ainsi l'intégrale sur k_z de la formule (7.31) pour la fonction d'onde diffractée et démontrons l'expression (7.33) pour les amplitudes de diffraction dans l'approximation de BORN.

Nous allons nous placer en $d = 2, 3$ dimensions.

7.B.1 Définition

Considérons l'opérateur différentiel

$$\mathcal{D} \equiv \triangle - U \, \mathrm{e}^{-2\kappa z} + k^2, \tag{7.B.22}$$

où $\triangle$ est le Laplacien en d dimensions et les quantités U et k^2 sont reliées à la hauteur du potentiel exponentiel $V_{\max}$ et à l'énergie incidente $E^{(d)}$:

$$U = \frac{2MV_{\max}}{\hbar^2}, \tag{7.B.23a}$$

$$k^2 = \frac{2ME^{(d)}}{\hbar^2}. \tag{7.B.23b}$$

La fonction de GREEN $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ de l'opérateur différentiel $\mathcal{D}$ satisfait aux deux conditions suivantes :

1. en fonction de la variable $\mathbf{r}$, $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ est solution à l'équation différentielle

$$\mathcal{D}G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \tag{7.B.24}$$

   où la fonction δ du membre droit représente l'opérateur identité dans l'espace des solutions régulières $\psi(\mathbf{r})$ de l'équation de SCHRÖDINGER

$$\mathcal{D}\psi(\mathbf{r}) = 0, \tag{7.B.25}$$

   c'est-à-dire des solutions qui s'annulent dans la région classiquement interdite $z \to -\infty$;

2. dans la région asymptotique $z \to +\infty$, $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ est une superposition d'ondes sortantes $\exp \mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$ avec $\mathbf{k}^2 = k^2$ et $k_z > 0$.

Nous notons que la première de ces conditions implique qu'en fonction de $\mathbf{r}$, la fonction de GREEN $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ a un comportement asymptotique analogue aux fonctions d'onde régulières $\psi(\mathbf{r})$, à savoir qu'elle s'annule elle aussi dans la limite $z \to -\infty$.

7.B.2 Enoncé

La fonction de GREEN $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ de l'opérateur différentiel (7.B.22) est donnée par

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{4}{(2\pi)^d}\int \mathrm{d}\mathbf{K} \int_{\mathcal{C}} \mathrm{d}k_z \, \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\,(\mathbf{R}-\mathbf{R}')}}{k^2-\mathbf{k}^2}\phi_{k_z}(z)\,\phi_{k_z}(z'), \tag{7.B.26}$$

où les vecteurs $\mathbf{r}$ et $\mathbf{k}$ ont les composantes $\mathbf{R}$ et $\mathbf{K}$ parallèles au plan $z = 0$ et les composantes z et k_z le long de l'axe Oz. Les fonctions d'onde $\phi_{k_z}(z)$ sont des solutions de l'équation de SCHRÖDINGER stationnaire en une dimension

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + U\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}\right)\phi_{k_z}(z) = k_z^2\,\phi_{k_z}(z) \tag{7.B.27}$$

avec les comportements asymptotiques

$$z \to -\infty : \qquad \phi_{k_z}(z) \;=\; 0 \tag{7.B.28a}$$

$$z \to +\infty : \qquad \phi_{k_z}(z) \;=\; \sin\Big[k_z z + \tfrac{1}{2}\Delta\varphi(k_z)\Big]\,. \tag{7.B.28b}$$

Les $\phi_{k_z}(z)$ ont l'expression

$$\phi_{k_z}(z) = \frac{k_z}{\kappa}\sqrt{\frac{\sinh(\pi k_z/\kappa)}{\pi k_z/\kappa}}K_{\mathrm{i}k_z/\kappa}(u_0\,\mathrm{e}^{-\kappa z}), \tag{7.B.29}$$

où $K_{\mathrm{i}k_z/\kappa}(u_0\mathrm{e}^{-\kappa z})$ est une fonction de BESSEL modifiée de la deuxième espèce. Le paramètre u_0 vaut

$$u_0 = \sqrt{\frac{U}{\kappa^2}}, \tag{7.B.30}$$

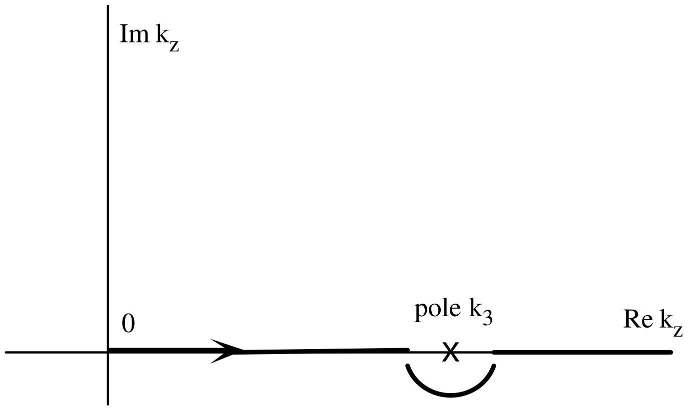

Figure 7.22: Chemin d'intégration $\mathcal{C}$ pour l'intégrale sur k_z dans la fonction de GREEN *(7.B.26).*

et le déphasage $\Delta\varphi(k_z)$ est donné par

$$\Delta\varphi(k_z) = -\frac{2k_z}{\kappa}\log(u_0/2) + 2\arg\Gamma(1 + \mathrm{i}k_z/\kappa)\,. \tag{7.B.31}$$

Le chemin d'intégration $\mathcal{C}$ pour la variable k_z dans l'intégrale (7.B.26) est esquissé sur la figure 7.22 : il part de l'origine vers $k_z = +\infty$ et contourne, dans le plan complexe, le pôle situé à $k_z = k_3 \equiv (k^2 - \mathbf{K}^2)^{1/2}$ en passant par le demi-plan inférieur[16] $\mathrm{Im}\,k_z < 0$.

Dans la région asymptotique $z \to +\infty$, la fonction de GREEN $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ a le comportement asymptotique suivant

$$\begin{aligned} &z \to +\infty\ : \\ &G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^{d-1}}\int\limits_{|\mathbf{K}|<k} \mathrm{d}\mathbf{K}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\,(\mathbf{R}-\mathbf{R}')}}{k_3}\exp\mathrm{i}\left[k_3 z + \tfrac{1}{2}\Delta\varphi(k_3)\right]\phi_{k_3}(z') \end{aligned} \tag{7.B.32}$$

avec

$$k_3 = +\sqrt{k^2 - \mathbf{K}^2} \quad \text{pour } |\mathbf{K}| < k. \tag{7.B.33}$$

Les vecteurs d'onde $\mathbf{K}$ avec $|\mathbf{K}| > k$ correspondent à des ondes évanescentes qui décroissent de façon exponentielle dans la limite $z \to +\infty$.

7.B.3 Démonstration

Equation différentielle. En échangeant l'opérateur différentiel $\mathcal{D}$ (7.B.22) avec les intégrales de la fonction de GREEN (7.B.26) et en utilisant l'équation de SCHRÖDIN-

[16]De façon équivalente, l'on peut préciser le chemin d'intégration en remplaçant le dénominateur $k^2 - \mathbf{k}^2$ dans (7.B.26) par $k^2 - \mathbf{k}^2 + \mathrm{i}0^+$ où 0^+ représente une quantité infinitésimale positive. Le pôle est ainsi déplacé vers $k_z = (k_3^2 + \mathrm{i}0^+)^{1/2}$ et se trouve donc dans le demi-plan supérieur $\mathrm{Im}\,k_z > 0$. En intégrant alors le long de l'axe réelle positive, le pôle est également situé au-dessus du chemin d'intégration.

GER (7.B.27) pour les fonctions d'onde $\phi_{k_z}(z)$, nous trouvons

$$\begin{aligned}\mathcal{D}G(\mathbf{r},\mathbf{r}') &= \frac{4}{(2\pi)^d}\int \mathrm{d}\mathbf{K}\int_{\mathcal{C}} \mathrm{d}k_z\,\frac{-\mathbf{K}^2-k_z^2+k^2}{k^2-\mathbf{k}^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\,(\mathbf{R}-\mathbf{R}')}\phi_{k_z}(z)\,\phi_{k_z}(z') \\ &= \frac{2}{\pi}\delta(\mathbf{R}-\mathbf{R}')\int_{\mathcal{C}} \mathrm{d}k_z\,\phi_{k_z}(z)\,\phi_{k_z}(z'). \end{aligned} \tag{7.B.34}$$

Notons que l'intégrand n'a plus de singularité proche de l'axe réelle [voir les fonctions d'onde (7.B.29)], nous pouvons donc remplacer le contour $\mathcal{C}$ par l'axe réelle positive.

Identité dans l'espace de solutions régulières. Il reste donc à montrer que l'intégrale suivante représente l'opérateur identité dans l'espace des solutions régulières $\phi_{k_z'}(z')$:

$$\frac{2}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}k_z\,\phi_{k_z}(z)\,\phi_{k_z}(z') = \delta(z-z'). \tag{7.B.35}$$

A cet effet, nous introduisons, en suivant G. ARMAND [103], une boîte de quantification en ajoutant une barrière de potentiel infini à la position $z = L$ dans la région asymptotique ($L \gg 1/\kappa$). La condition que les fonctions d'onde $\phi_{k_z}(z)$ (7.B.29) s'annulent pour $z = L$, entraîne alors que les vecteurs d'onde k_z sont quantifiés :

$$k_z = k_m \quad \text{avec} \quad k_m L + \tfrac{1}{2}\Delta\varphi(k_m) = m\pi, \quad m = 1, 2, \ldots \tag{7.B.36}$$

A la limite $L \gg 1/\kappa$, le terme $k_m L$ dans (7.B.36) l'emporte sur le déphasage (7.B.31) et les vecteurs d'onde quantifiés k_m ont un espacement

$$\delta k_z = \frac{\pi}{L}. \tag{7.B.37}$$

Les fonctions d'ondes $\phi_{k_m}(z)$ sont orthogonales

$$\left\langle \phi_{k_m} | \phi_{k_{m'}} \right\rangle \equiv \int \mathrm{d}z\,\phi^*_{k_m}(z)\,\phi_{k_{m'}}(z) = 0 \quad \text{pour} \quad m \neq m', \tag{7.B.38}$$

et le comportement asymptotique (7.B.28b) implique que la norme des $\phi_{k_m}(z)$ vaut

$$\langle \phi_{k_m} | \phi_{k_m} \rangle = \frac{L}{2}. \tag{7.B.39}$$

Nous pouvons alors écrire l'opérateur identité $\mathbf{I}$ pour les fonctions d'onde régulières dans la boîte de quantification de la façon suivante :

$$\mathbf{I} = \frac{2}{L}\sum_{m=1}^{\infty} |\phi_{k_m}\rangle \langle \phi_{k_m}| \,. \tag{7.B.40}$$

A la limite d'une boîte infinie, $L \to \infty$, la somme sur les k_m devient une intégrale, et avec l'espacement δk_z (7.B.37), nous avons la représentation suivante

$$\mathbf{I} = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}k_z \, |\phi_{k_z}\rangle \langle \phi_{k_z}| \,. \tag{7.B.41}$$

En représentation position, le membre gauche devient une fonction $\delta(z - z')$. Ceci complète la demonstration de la formule (7.B.35) et de l'équation différentielle (7.B.24) pour la fonction de GREEN.

Comportement dans la région asymptotique $z \to +\infty$**.** Il reste à étudier le comportement asymptotique (7.B.32) de la fonction de GREEN $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ à la limite $z \to +\infty$. Plus précisément, compte tenu du comportement asymptotique (7.B.28b) des fonctions d'onde $\phi_{k_z}(z)$, il suffit d'établir la formule suivante

$$\frac{2}{\pi} \int_{\mathcal{C}} \mathrm{d}k_z \frac{\sin\left[k_z z + \frac{1}{2}\Delta\varphi(k_z)\right]}{k_3^2 - k_z^2} \phi_{k_z}(z') = -\frac{1}{k_3} \exp \mathrm{i} \left[k_3 z + \tfrac{1}{2}\Delta\varphi(k_3)\right] \phi_{k_3}(z'), \tag{7.B.42}$$

où $k_3 > 0$ est défini à l'équation (7.B.33).

En suivant N. CABRERA *et al.* [58], nous notons qu'en fonction de k_z, la fonction d'onde $\phi_{k_z}(z')$ est impaire.[17] Comme le $\sin$ dans (7.B.42) donne le comportement asymptotique de $\phi_{k_z}(z)$, il est également impaire en fonction de k_z. Par conséquent, l'intégrand dans (7.B.42) est pair, et nous pouvons remplacer l'intégrale sur k_z par

$$\int_{\mathcal{C}} \mathrm{d}k_z = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{C}'} \mathrm{d}k_z, \tag{7.B.43}$$

où le chemin d'intégration $\mathcal{C}'$ commence à $k_z = -\infty$, contourne le pôle situé à $k_z = -k_3$ par le demi-plan supérieur et celui situé à $k_z = +k_3$ par le demi-plan inférieur et se termine à $k_z = +\infty$ (voir la figure 7.23).

Introduisons maintenant l'expression (7.B.29) pour la fonction d'onde $\phi_{k_z}(z)$ dans l'intégrale (7.B.42) ; il vient

$$\mathcal{I} \equiv \frac{1}{\pi} \int_{\mathcal{C}'} \mathrm{d}k_z \frac{\sin\left[k_z z + \frac{1}{2}\Delta\varphi(k_z)\right]}{k_3^2 - k_z^2} \frac{k_z}{\kappa} \sqrt{\frac{\sinh(\pi k_z/\kappa)}{\pi k_z/\kappa}} K_{\mathrm{i}k_z/\kappa}(u_0 \mathrm{e}^{-\kappa z'}). \tag{7.B.44}$$

En utilisant la définition (7.B.31) du déphasage $\Delta\varphi(k_z)$ et la propriété suivante de la fonction Γ (pour k_z réel)

$$|\Gamma(1 + \mathrm{i}k_z/\kappa)| = \sqrt{\frac{\pi k_z/\kappa}{\sinh(\pi k_z/\kappa)}}, \tag{7.B.45}$$

[17]Voir l'expression (7.B.29) pour $\phi_{k_z}(z')$. La fonction de BESSEL $K_{\mathrm{i}k_z/\kappa}(u_0 \mathrm{e}^{-\kappa z'})$ est paire en fonction de k_z (M. ABRAMOWITZ et I. STEGUN, *Handbook of Mathematical Functions*, formule 9.6.6).

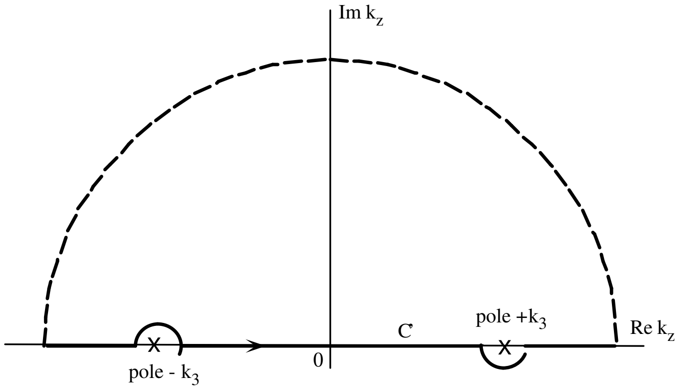

Figure 7.23: Chemin d'intégration $\mathcal{C}'$ pour l'intégrale $\mathcal{I}$ sur k_z dans (7.B.44). Le demi-cercle symbolise la fermeture du chemin $\mathcal{C}'$ à l'infini pour le calcul de l'intégrale $\mathcal{I}_+$ dans (7.B.47).

nous obtenons l'expression suivante

$$\sin\Big[k_z z + \tfrac{1}{2}\Delta\varphi(k_z)\Big] \sqrt{\frac{\sinh(\pi k_z/\kappa)}{\pi k_z/\kappa}} = \\ \frac{1}{2\mathrm{i}}\left\{\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_z[z-\kappa^{-1}\log(u_0/2)]}}{\Gamma(1-\mathrm{i}k_z/\kappa)} - \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_z[z-\kappa^{-1}\log(u_0/2)]}}{\Gamma(1+\mathrm{i}k_z/\kappa)}\right\}, \tag{7.B.46}$$

qui donne la continuation analytique du membre gauche à des valeurs complexes de k_z.

L'intégrale $\mathcal{I}$ (7.B.44) devient alors la somme de deux intégrales, $\mathcal{I} = \mathcal{I}_+ + \mathcal{I}_-$, dont la première s'écrit

$$\mathcal{I}_+ \equiv \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \int_{\mathcal{C}'} \mathrm{d}k_z \frac{k_z/\kappa}{k_3^2 - k_z^2} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_z[z-\kappa^{-1}\log(u_0/2)]}}{\Gamma(1-\mathrm{i}k_z/\kappa)} K_{\mathrm{i}k_z/\kappa}(u_0\mathrm{e}^{-\kappa z'}). \tag{7.B.47}$$

Dans la limite $z \to +\infty$, nous pouvons supposer que $z - \kappa^{-1}\log(u_0/2) > 0$ et fermer le chemin d'intégration $\mathcal{C}'$ par un demi-cercle à l'infini dans le demi-plan supérieur $\mathrm{Im}\, k_z > 0$ (voir la figure 7.23). A cause de l'exponentielle $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_z[z-\kappa^{-1}\log(u_0/2)]}$, le demi-cercle à l'infini ne contribue pas à la valeur de l'intégrale. D'après le théorème de CAUCHY, l'intégrale (7.B.47) est déterminée par les pôles de l'intégrand qu'enferme le chemin d'intégration. Il est bien connu[18] que la fonction $1/\Gamma(1 + \mathrm{i}k_z/\kappa)$ n'a pas de singularités dans le plan complexe de la variable k_z. Il en est de même[19] pour la fonction de BESSEL $K_{\mathrm{i}k_z/\kappa}(u_0\mathrm{e}^{-\kappa z})$. L'intégrand a donc deux pôles simples pour $k_z = \pm k_3$ dont seulement le pôle $k_z = +k_3$ se trouve à l'intérieur du chemin d'intégration

[18] ABRAMOWITZ et STEGUN, *op. cit.*, chap. 6.1.
[19] ABRAMOWITZ et STEGUN, *op. cit.*, chap. 9.1 et formule 9.6.4.

(au-dessus du chemin $\mathcal{C}'$). Le théorème de CAUCHY donne alors le résultat suivant

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_+ &= -\frac{k_3/\kappa}{2k_3} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_3[z-\kappa^{-1}\log(u_0/2)]}}{\Gamma(1-\mathrm{i}k_3/\kappa)} K_{\mathrm{i}k_3/\kappa}(u_0\mathrm{e}^{-\kappa z'}) & (7.B.48) \\ &= -\frac{1}{2k_3} \exp\mathrm{i}\left[k_3 z + \tfrac{1}{2}\Delta\varphi(k_3)\right] \phi_{k_3}(z'). & (7.B.49) \end{aligned}$$

En passant à la deuxième ligne, nous avons utilisé la définition (7.B.29) de la fonction d'onde $\phi_{k_3}(z)$, le déphasage $\Delta\varphi(k_3)$ (7.B.31) et la propriété (7.B.45) de la fonction Γ, étant donné que k_3 est réel.

De façon analogue, mais en fermant le chemin d'intégration $\mathcal{C}'$ par un demi-cercle dans le plan inférieur $\mathrm{Im}\, k_z < 0$, l'on démontre que la deuxième intégrale

$$\mathcal{I}_- \equiv -\frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \int\limits_{\mathcal{C}'} \mathrm{d}k_z \frac{k_z/\kappa}{k_3^2 - k_z^2} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_z[z-\kappa^{-1}\log(u_0/2)]}}{\Gamma(1+\mathrm{i}k_z/\kappa)} K_{\mathrm{i}k_z/\kappa}(u_0\mathrm{e}^{-\kappa z'}). \tag{7.B.50}$$

a la même valeur (7.B.49) que $\mathcal{I}_+$. Ceci complète la démonstration de la formule (7.B.42), ainsi que du comportement asymptotique (7.B.32) de la fonction de GREEN $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$.

7.C Eléments de matrice du potentiel exponentiel (I)

Nous calculons dans cette annexe l'élément de matrice (7.35)

$$\left\langle \phi_{k_f}(z) \middle| U\,\mathrm{e}^{-2\kappa z} \middle| \phi_{k_i}(z) \right\rangle \tag{7.C.51}$$

où les $\phi_{k_{if}}(z)$ sont des fonctions propres de l'équation de SCHRÖDINGER stationnaire avec le potentiel exponentiel $U\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}$. Rappelons qu'elles sont données par

$$\phi_{k_{if}}(z) = \sqrt{\frac{k_{if}}{\pi\kappa} \sinh\left(\pi k_{if}/\kappa\right)}\, K_{\mathrm{i}k_{if}/\kappa}\left(u_0\,\mathrm{e}^{-\kappa z}\right), \tag{7.C.52}$$

avec $K_{\mathrm{i}k_{if}/\kappa}(u_0\,\mathrm{e}^{-\kappa z})$ une fonction de BESSEL modifiée de la deuxième espèce et $u_0 = (U/\kappa^2)^{1/2}$.

Pour évaluer l'élément de matrice, nous utilisons le changement de variable $z \mapsto u = u_0\,\mathrm{e}^{-\kappa z}$ (voir aussi [68]). L'expression (7.C.51) se ramène alors à

$$\left\langle \phi_{k_f}(z) \middle| U\,\mathrm{e}^{-2\kappa z} \middle| \phi_{k_i}(z) \right\rangle = \frac{1}{\pi}\sqrt{k_f\, k_i \sinh\left(\pi k_f/\kappa\right)\, \sinh\left(\pi k_i/\kappa\right)}\, \mathcal{I}(k_f, k_i) \tag{7.C.53}$$

avec

$$\mathcal{I}(k_f, k_i) \equiv \int\limits_0^\infty \mathrm{d}u\, u\, K_{\mathrm{i}k_f/\kappa}(u)\, K_{\mathrm{i}k_i/\kappa}(u). \tag{7.C.54}$$

Pour évaluer cette intégrale, nous utilisons la représentation intégrale suivante pour les fonctions de BESSEL[20]

$$K_{\mathrm{i}k/\kappa}(u) = \frac{\kappa}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\zeta\, \mathrm{e}^{-u\cosh\kappa\zeta + \mathrm{i}k\zeta}, \tag{7.C.55}$$

qui permet d'effectuer l'intégration sur u dans (7.C.54), avec le résultat

$$\mathcal{I}(k_f, k_i) = \frac{\kappa^2}{4}\int \mathrm{d}\zeta\, \mathrm{d}\zeta' \frac{\exp \mathrm{i}(k_f\zeta + k_i\zeta')}{(\cosh\kappa\zeta + \cosh\kappa\zeta')^2}. \tag{7.C.56}$$

Un autre changement de variable, $\{\zeta, \zeta'\} \mapsto \{\tau = \kappa(\zeta + \zeta')/2, \tau' = \kappa(\zeta - \zeta')/2\}$ permet de factoriser l'intégrale (7.C.56) et de la ramener à la transformée de FOURIER de $1/\cosh^2$:

$$\mathcal{I}(k_f, k_i) = \frac{1}{8}\int \mathrm{d}\tau\, \frac{\exp \mathrm{i}[(k_f + k_i)\tau/\kappa]}{\cosh^2\tau}\int \mathrm{d}\tau'\, \frac{\exp \mathrm{i}[(k_f - k_i)\tau'/\kappa]}{\cosh^2\tau'}. \tag{7.C.57}$$

Le résultat (6.A.6) de l'annexe 6.A donne alors

$$\mathcal{I}(k_f, k_i) = \frac{1}{2}\beta\left(\frac{k_f + k_i}{\kappa}\right)\beta\left(\frac{k_f - k_i}{\kappa}\right). \tag{7.C.58}$$

En utilisant la définition (6.12) du facteur d'obliquité β, nous avons donc

$$\mathcal{I}(k_f, k_i) = \frac{1}{2}\frac{\pi(k_f + k_i)/2\kappa}{\sinh\pi(k_f + k_i)/2\kappa}\frac{\pi(k_f - k_i)/2\kappa}{\sinh\pi(k_f - k_i)/2\kappa}. \tag{7.C.59}$$

Compte tenu de (7.C.53), ceci complète la démonstration de l'élément de matrice (7.35).

[20]ABRAMOWITZ et STEGUN, *op. cit.*, équation 9.6.24.

Chapitre 8

L'approximation du réseau de phase mince

Introduction

Nous présentons dans ce chapitre une méthode d'approximation qui permet de caractériser la diffraction d'atomes dans le régime semi-classique. Dans ce régime, les trajectoires classiques servent à calculer la phase de la fonction d'onde. En optique lumineuse, une approche équivalente est celle de l'optique géométrique[1] où la phase du champ lumineux est donnée par le chemin optique d'un rayon lumineux, divisé par la longueur d'onde réduite $\lambda/2\pi$. Cette approche s'avère particulièrement adaptée pour déterminer la figure de diffraction pour un réseau de phase. C'est alors une modulation spatiale de la phase du champ lumineux (ou de la fonction d'onde atomique) qui est à l'origine de la diffraction. Le problème se réduit donc au calcul d'un déphasage.

Nous allons d'abord étudier la diffraction par un réseau de phase du point de vue de l'optique lumineuse (au paragraphe 8.1). Nous introduisons de façon intuitive l'approximation du «réseau de phase mince» qui est une approche moins générale que l'optique géométrique habituelle, et qui consiste à calculer la phase du champ non pas le long des vrais rayons géométriques qui sont courbes dans le réseau (comme le fait l'optique géométrique), mais le long des rayons rectilignes que la lumière suivrait en absence de réseau. Nous comparons cette approche à l'optique géométrique.

Au paragraphe 8.2, nous revenons aux atomes et considérons leur diffraction par une onde stationnaire lumineuse dans une géométrie de transmission. L'approximation de RAMAN–NATH est rappelée qui permet de caractériser la figure de diffraction au-delà de la limite perturbative. Nous montrons qu'elle est équivalente à l'approche du réseau de phase mince de l'optique et nous en étudions les conditions de validité.

[1]Au sens strict, la notion de phase du champ lumineux n'existe pas dans l'optique géométrique. Cependant, il semble naturel de l'introduire par la construction énoncée dans le texte si bien que, par abus de langage, nous convenons de l'inclure dans ce que nous appelons "optique géométrique" dans le présent mémoire.

Dans la partie centrale de ce chapitre, au paragraphe 8.3, nous mettrons en évidence que ces deux approches équivalentes, celle du réseau de phase mince de l'optique et celle de RAMAN–NATH sont des cas particuliers d'un développement perturbatif de la phase atomique au premier ordre par rapport à un potentiel perturbateur faible. C'est par ce développement perturbatif que nous définissons dans ce mémoire l'approximation du réseau de phase mince.

Dans la suite (au paragraphe 8.4), l'approximation du réseau de phase mince permet de calculer la figure de diffraction d'atomes par une onde évanescente stationnaire, donc dans une géométrie de réflexion. Nous comparons ses résultats à ceux de l'approximation de BORN du chapitre 7, ainsi qu'au calcul classique de la distribution de vitesse du chapitre 6. A l'aide de l'exemple de la diffraction par l'onde évanescente stationnaire, nous confrontons finalement au paragraphe 8.4.7 l'approximation du réseau de phase mince au calcul semi-classique de la figure de diffraction dans l'esprit de l'optique géométrique. Cette approche semi-classique est une généralisation de l'approximation de BRILLOUIN, KRAMERS et WENTZEL (l'approximation «BKW») à un nombre de dimensions arbitraire.

L'annexe 8.A de ce chapitre reproduit l'article «*Atomic diffraction by a thin phase grating*» par C. H., J.-Y. COURTOIS, et A. ASPECT, paru au *Journal de Physique III (France)* **4**, pp. 1955–74 (1994). Nous ferons référence aux équations de cet article par le signet «**ADif**».

8.1 Diffraction de la lumière par un objet de phase

Considérons la diffraction d'une onde lumineuse par un objet de phase dont l'indice de réfraction varie dans l'espace (voir la figure 8.1) et plaçons-nous dans le point de vue de l'optique géométrique. Lorsqu'un rayon lumineux traverse l'objet, la variation de l'indice a deux effets : d'une part, le chemin optique le long du rayon est modifié, et d'autre part, le rayon s'écarte de sa direction initiale parce qu'il y a un gradient de l'indice. La modification du chemin optique donne le déphasage du champ lumineux après la traversée de l'objet, et l'on obtient la figure de diffraction dans le champ lointain en prenant la transformée de FOURIER du champ lumineux déphasé.

Si l'objet de phase a une épaisseur faible, les rayons lumineux s'écartent peu de leur direction initiale à l'intérieur de l'objet de phase. Dans ce régime, la phase du champ lumineux peut être calculée le long des rayons rectilignes que la lumière suivrait en absence de l'objet. La modification du chemin optique s'obtient alors simplement en accumulant la variation de l'indice à travers l'objet, le long de la direction de l'onde lumineuse incidente. Ce régime est habituellement appelé celui du *réseau de phase mince* ou encore de l'hologramme mince. Ses conditions de validité sont quelque peu floues dans la littérature. Dans ce mémoire, nous allons utiliser le terme *approximation du réseau de phase mince* pour l'approximation qui consiste à calculer la phase du champ lumineux le long des rayons que la lumière suivrait si la modulation d'indice n'existait pas.

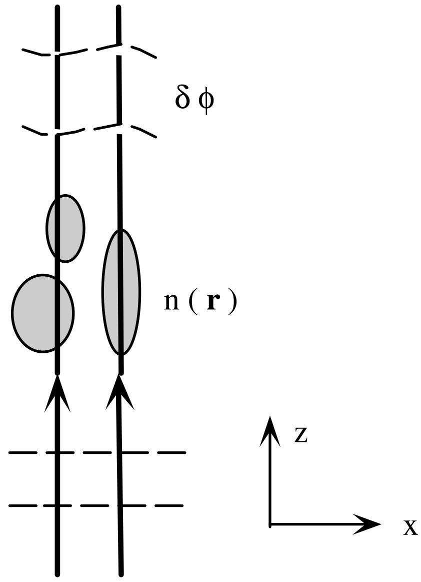

Figure 8.1: Diffraction d'une onde lumineuse par un objet de phase.

Pour fixer les idéees, étudions un réseau de phase dont l'indice varie de façon sinusoïdale dans la direction Ox, avec une période a et une amplitude de variation δn, et soit e l'épaisseur du réseau dans la direction Oz (voir la figure 8.2). Lorsque une onde lumineuse traverse le réseau en incidence normale (parallèle à la direction Oz), elle accumule un déphasage $\Delta\varphi(x)$ qui est modulé lui aussi de façon sinusoïdale, avec une amplitude de modulation u_{opt} donnée par

$$u_{\text{opt}} = k_L e\, \delta n \tag{8.1}$$

où k_L est le (module du) vecteur d'onde optique dans le vide. Le champ lumineux est donc spatialement modulé en phase, ce qui implique que les intensités I_n des ordres de diffraction sont données par les fonctions de BESSEL :

$$I_n = I_{\text{inc}}\, J_n^2(u_{\text{opt}}) \tag{8.2}$$

où I_{inc} est l'intensité incidente. La figure de diffraction est caractérisée par le paramètre u_{opt} que l'on appelle *indice de modulation*. Elle présente des bandes latérales faibles si l'indice de modulation est petit devant l'unité. Dans ce régime, nous pouvons également obtenir la figure de diffraction à l'aide d'une approche perturbative, analogue à l'approximation de BORN. L'intérêt de l'approximation du réseau de phase mince est qu'elle permet aussi de décrire le régime d'une modulation de phase forte où l'indice de modulation u_{opt} est grand devant l'unité. Dans ce qui suit, nous allons nous concentrer sur ce régime. Un certain nombre d'ordres supérieurs apparaissent alors de façon symétrique de part et d'autre de l'ordre spéculaire dans la figure de diffraction. Les propriétés des fonctions de BESSEL impliquent que le nombre des ordres $n_{\max}$ qui

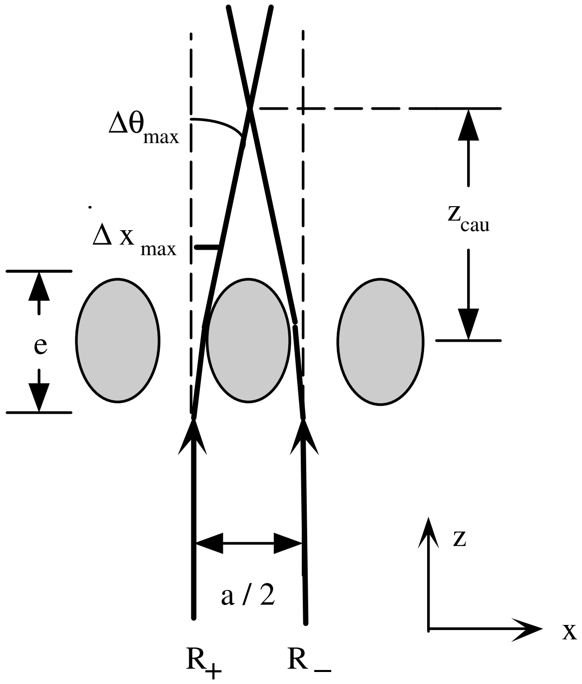

Figure 8.2: Rayons lumineux dans un réseau de phase sinusoïdal.

sont présents dans la figure de diffraction est de l'ordre de $n_{\max} \simeq u_{\text{opt}}$. Pour cet ordre, l'angle de diffraction vaut $\Delta\theta_{\max}$, avec[2]

$$\Delta\theta_{\max} = \frac{\lambda_L}{a} n_{\max} \simeq \frac{2\pi e\,\delta n}{a}. \tag{8.3}$$

Cet angle est faible pour la diffraction par une onde acoustique, par exemple, parce que l'amplitude de variation de l'indice δn est généralement très inférieure à l'unité.

Etudions à l'aide de cet exemple les conditions sous lesquelles l'approximation du réseau de phase mince est valable. La figure 8.2 montre un rayon lumineux qui est dévié de l'angle $\Delta\theta_{\max}$ par le gradient d'indice (le rayon «R_+»). Dans la direction Ox, il s'est déplacé d'une distance $\Delta x_{\max}$ après avoir traversé l'épaisseur e du réseau, avec $\Delta x_{\max} = e \tan \Delta\theta_{\max}$. Nous obtenons une condition nécessaire pour la validité de l'approximation du réseau de phase mince, en demandant que ce déplacement soit faible devant la période a du réseau :

$$\frac{\Delta x_{\max}}{a} = \frac{e}{a} \tan \Delta\theta_{\max} \ll 1. \tag{8.4}$$

[2]Du point de vue de l'optique géométrique, la déviation angulaire maximale correspond à un rayon lumineux qui traverse le réseau de phase aux positions où le gradient d'indice est maximal. Comme le rayon de courbure du rayon est égal à l'inverse du gradient d'indice, $\rho_c \simeq a/2\pi\delta n$, l'angle de déviation du rayon est de l'ordre $e/\rho_c \simeq 2\pi e\,\delta n/a$ identique à (8.3). Le maximum de la figure de diffraction à cet angle est appelé un «arc-en-ciel» [107, 74].

En utilisant l'expression (8.3) pour l'angle de déviation maximal $\Delta\theta_{\text{max}}$, cette condition est remplie dans le régime caractérisé par

$$\frac{2\pi e^2\,\delta n}{a^2} \ll 1. \tag{8.5}$$

(Pour alléger les formules, nous avons supposé que l'angle maximal $\Delta\theta_{\text{max}}$ est faible.) Ce régime impose une limite supérieure à l'épaisseur e du réseau, en-dessous de laquelle l'approximation du réseau de phase mince est valable.

Cependant, nous voyons dans la figure 8.2 que derrière le réseau, le rayon lumineux « R_+ » croise un autre rayon « R_- ». Ce rayon a traversé le réseau une demi-période plus loin dans la direction Ox et a été dévié par l'angle $-\Delta\theta_{\text{max}}$. Les deux rayons se croisant à une distance $z_{\text{cau}} = a/(4\tan\Delta\theta_{\text{max}})$. A cette position apparaît une caustique dans le champ lumineux et l'optique géométrique n'y est plus valable. Mais, si la caustique se trouve loin derrière le réseau de phase, l'on peut se servir des rayons géométriques pour calculer le champ lumineux jusqu'à une surface située entre le réseau et la caustique. A partir de cette surface, le principe de HUYGHENS–FRESNEL permet de propager le champ vers l'infini, et l'on trouve ainsi la figure de diffraction. La condition que la caustique se trouve loin derrière le réseau s'écrit

$$\frac{z_{\text{cau}}}{e} = \frac{a}{4e\tan\Delta\theta_{\text{max}}} \gg 1, \tag{8.6}$$

et en comparant au critère (8.4), nous constatons que, à un facteur numérique près, cette condition est équivalente à un déplacement Δx_{max} du rayon lumineux petit devant la période a du réseau.

L'équivalence entre les conditions (8.4) et (8.6) est un peu surprenante, car tandis que (8.4) est nécessaire pour la validité de l'approximation du réseau de phase mince où l'on calcule la phase du champ lumineux le long des rayons rectilignes, la condition (8.6) caractérise la validité de l'optique géométrique qui calcule la phase du champ lumineux le long des « vrais » rayons lumineux qui sont courbés par le gradient d'indice. Physiquement, il paraît évident que cette dernière approche permet d'obtenir une description plus précise du champ lumineux, et ceci implique que l'approximation du réseau de phase mince doit être sujette à une condition de validité supplémentaire qui soit plus restrictive que la condition (8.4). Nous concluons donc que la condition d'un déplacement du rayon lumineux faible devant le pas du réseau, $\Delta x_{\text{max}} \ll a$, caractérise la validité de l'optique géométrique, mais non pas la validité de l'approximation du réseau de phase mince. Il s'agit certes d'une condition nécessaire, mais non pas suffisante.

Nous verrons dans la suite de ce chapitre que l'approximation du réseau de phase mince peut également s'utiliser en optique atomique, et nous mettrons en évidence ses conditions de validité de façon plus précise dans ce contexte-là.

8.2 La diffraction d'atomes par un réseau de lumière dans l'approximation de RAMAN et NATH

Avant de revenir à la réflexion d'atomes par l'onde évanescente stationnaire, nous allons rappeler la diffraction d'atomes dans une géométrie de transmission, par une onde stationnaire formée par deux ondes lumineuses progressives. Ce phénomène est précisément la transposition à l'optique atomique de la diffraction de la lumière par un réseau d'indice, où les rôles de la lumière et de la matière sont échangés. La diffraction d'atomes sur un réseau de lumière est aussi appelée effet KAPITZA–DIRAC et a été étudiée abondamment en optique atomique, aussi bien du point de vue expérimental [108, 47, 109, 53] que théorique [42, 43, 110, 45, 40, 49].

Dans ce paragraphe, nous rappelons le calcul de la figure de diffraction d'atomes par un réseau de lumière dans l'approximation de RAMAN–NATH.[3] Cette approche suppose que le temps d'interaction avec l'onde stationnaire est «court» de sorte que la vitesse de l'atome reste approximativement constante lors de la traversée du réseau. Notons que cette approximation permet aussi de caractériser une situation où la diffraction peuple des ordres supérieurs. En étudiant les hypothèses sous-jacentes à cette approche, nous montrons qu'elle transpose l'approximation du réseau de phase mince de l'optique lumineuse à l'optique atomique. Nous en étudions ensuite les conditions de validité.

8.2.1 Calcul de la figure de diffraction

Comme dans les chapitres précédents, nous modélisons l'atome par un système à deux niveaux et nous nous plaçons dans le régime de faible saturation de la transition atomique. Nous décrivons donc l'interaction de l'atome avec les ondes lumineuses par le potentiel dipolaire et négligeons l'émission spontanée. Pour une onde stationnaire formée par deux ondes progressives, le potentiel dipolaire est de la forme (l'indice «KD» rappelle qu'il s'agit du potentiel dipolaire pour l'effet KAPITZA–DIRAC)

$$V_{\mathrm{KD}}(x,z) = V_1 f(z)\,(1+\cos 2k_L x)\,, \tag{8.7}$$

où la hauteur V_1 est proportionnelle à l'intensité lumineuse [voir l'équation (1.16)]. La fonction sans dimension $f(z)$ donne le profil de l'onde lumineuse perpendiculairement à la direction de propagation, elle est centrée à $z=0$. Nous dénotons w son intégrale sur l'axe Oz, cette longueur correspond à l'épaisseur de l'onde stationnaire dans la direction Oz. La période du réseau de diffraction est égale la moitié de la longueur d'onde optique.

Considérons des atomes incidents depuis $z=-\infty$ en incidence normale, avec une énergie cinétique $E_i = \hbar^2 k_{zi}^2/2M$ beaucoup plus grande que la valeur maximale V_1

[3] Notons que l'approximation de RAMAN-NATH a été développée dans le contexte du problème d'optique lumineuse du paragraphe précédent, à savoir la diffraction de la lumière par une onde acoustique (BORN et WOLF, *op. cit.*, Chap. XII).

du potentiel dipolaire, d'une part, et que l'« énergie de recul » $\hbar^2 k_L^2/2M$, d'autre part. Nous pouvons alors faire l'approximation paraxiale : séparons le mouvement le long de l'axe Oz de la fonction d'onde :

$$\psi(x,z) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_{zi}z}\phi(x,z), \tag{8.8}$$

et supposons que l'amplitude $\phi(x,z)$ varie lentement en fonction de z à l'échelle de la longueur d'onde atomique $2\pi/k_{zi}$. L'équation de SCHRÖDINGER stationnaire

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_{\mathrm{KD}}(x,z)\right]\psi(x,z) = E_i\,\psi(x,z) \tag{8.9}$$

donne alors l'équation suivante

$$\mathrm{i}\hbar v_{zi}\frac{\partial\phi}{\partial z} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + V_{\mathrm{KD}}(x,z)\phi(x,z), \tag{8.10}$$

où la vitesse v_{zi} est liée au vecteur d'onde k_{zi} par $v_{zi} = \hbar k_{zi}/M$. En développant $\phi(x,z)$ en une série de FOURIER par rapport à x,

$$\phi(x,z) = \sum_n b_n(z)\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}nk_L x}, \tag{8.11}$$

on trouve le système d'équations suivant pour les coefficients $b_n(z)$:

$$\mathrm{i}\hbar v_{zi}\frac{\mathrm{d}b_n}{\mathrm{d}z} = 4E_{\mathrm{rec}}n^2\,b_n(z) + V_1 f(z)\left\{b_n(z) + \tfrac{1}{2}b_{n-1}(z) + \tfrac{1}{2}b_{n+1}(z)\right\}, \tag{8.12}$$

où nous avons noté $E_{\mathrm{rec}} \equiv \hbar^2 k_L^2/2M$ l'énergie de recul associée au vecteur d'onde lumineux k_L.

L'approximation de RAMAN et NATH consiste à négliger le premier terme du membre droit de l'équation (8.12), qui correspond à l'énergie cinétique des ondes diffractées. Il est alors possible de trouver une solution analytique [111] pour les coefficients de FOURIER $b_n(z)$: on impose la condition initiale

$$z \to -\infty \; : \qquad b_n(z) = \delta_{n,0} \tag{8.13}$$

qui exprime que les atomes sont incidents dans l'ordre $n = 0$. En utilisant l'identité pour les fonctions de BESSEL

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}J_n(u) = \frac{1}{2}\left[J_{n-1}(u) - J_{n+1}(u)\right], \tag{8.14}$$

on montre que les $b_n(z)$ sont donnés par

$$b_n(z) = (-\mathrm{i})^n\,\exp[-\mathrm{i}u_{\mathrm{KD}}(z)]\,J_n[u_{\mathrm{KD}}(z)]\,. \tag{8.15}$$

où l'argument $u_{\mathrm{KD}}(z)$ des fonctions de BESSEL vaut

$$u_{\mathrm{KD}}(z) = \frac{V_1}{\hbar\, v_{zi}} \int\limits_{-\infty}^{z} \mathrm{d}z'\, f(z'). \tag{8.16}$$

Nous notons qu'il varie à l'échelle de l'épaisseur w de l'onde stationnaire. Dans la limite $z \to +\infty$, la solution (8.15) donne alors les amplitudes de diffraction

$$a_n = \lim_{z\to+\infty} b_n(z) = (-\mathrm{i})^n \exp(-\mathrm{i}u_{\mathrm{KD}})\, J_n(u_{\mathrm{KD}})\,, \tag{8.17}$$

où u_{KD} vaut

$$u_{\mathrm{KD}} = \frac{V_1 w}{\hbar\, v_{zi}}. \tag{8.18}$$

Comme les atomes sont incidents avec une vitesse v_{zi} beaucoup plus grande que la vitesse de recul $\hbar k_L/M$, les angles de diffraction sont très proches de l'axe Oz. Par conséquent, nous pouvons négliger le facteur $k_{zn}/k_{zi} = \cos\theta_n/\cos\theta_i$ dans l'équation (7.17) pour les populations des ordres de diffraction et obtenons :

$$w_n^{(\mathrm{KD})} = |a_n|^2 = J_n^2(u_{\mathrm{KD}}). \tag{8.19}$$

Ce résultat est identique à la figure de diffraction optique (8.2) pour un réseau de phase sinusoïdal, à une normalisation près.

8.2.2 Equivalence à l'approximation du réseau de phase mince

Regardons de plus près les approximations que nous avons faites lors de ce calcul. Tout d'abord, nous avons supposé que l'énergie incidente est beaucoup plus grande que la hauteur du potentiel. Par conséquent, l'atome traverse l'onde stationnaire avec une composante de vitesse v_{zi} constante le long de l'axe Oz. Ensuite, en faisant l'approximation d'une enveloppe $\phi(x, z)$ lentement variable à l'échelle de la longueur d'onde atomique, nous supposons que la longueur d'onde atomique est beaucoup plus courte que l'épaisseur du réseau de diffraction : $2\pi/k_{zi} \ll w$. La longueur d'onde atomique est également plus courte que la période π/k_L du réseau parce que la vitesse incidente v_{zi} est beaucoup plus grande que la vitesse de recul $\hbar k_L/M$. Nous nous sommes donc placé dans le régime semi-classique.

Finalement, en faisant l'approximation de RAMAN–NATH dans le système d'équations (8.12), l'équation de SCHRÖDINGER (8.10) a été remplacée par

$$\mathrm{i}\hbar v_{zi}\frac{\partial\phi}{\partial z} = V_{\mathrm{KD}}(x, z)\phi(x, z) \tag{8.20}$$

où l'opérateur de l'énergie cinétique transverse $-(\hbar^2/2M)(\partial^2/\partial x^2)$ est négligé. Comme la coordonnée x est alors un paramètre dans (8.20), nous pouvons ignorer le déplacement de l'atome dans la direction Ox. En effet, l'équation (8.20) a la solution simple suivante :

$$\phi(x,z) = \exp[\mathrm{i}\Delta\varphi(x,z)]\ \phi(x, z=-\infty), \tag{8.21}$$

où le déphasage de la fonction d'onde est donné par

$$\Delta\varphi(x,z) = -\frac{1}{\hbar v_{zi}} \int_{-\infty}^{z} \mathrm{d}z'\, V_{\mathrm{KD}}(x,z') = -\frac{V_1}{\hbar v_{zi}} \int_{-\infty}^{z} \mathrm{d}z'\, f(z')\,(1+\cos 2k_L x)\,, \tag{8.22}$$

et nous constatons qu'il est obtenu en intégrant le potentiel dipolaire $V_{\mathrm{KD}}(x,z)$ le long de la trajectoire rectiligne qui traverse l'onde stationnaire à une position x donnée.

En utilisant l'identité suivante pour les fonctions de BESSEL[4]

$$\exp\left(-\mathrm{i}u\cos 2k_L x\right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-\mathrm{i})^n\, J_n(u) \exp 2\mathrm{i}nk_L x, \tag{8.23}$$

l'expression (8.21) pour la fonction d'onde admet le développement de FOURIER

$$\phi(x,z) = \sum_n (-\mathrm{i})^n\ \exp[-\mathrm{i}u_{\mathrm{KD}}(z)]\, J_n[u_{\mathrm{KD}}(z)] \exp 2\mathrm{i}nk_L x, \tag{8.24}$$

avec $u_{\mathrm{KD}}(z)$ donné par (8.16). En comparant aux coefficients de FOURIER (8.15), nous constatons que ce résultat est équivalent à celui du calcul précédent.

Après l'interaction avec le réseau de diffraction, le déphasage (8.22) vaut

$$z \gg w\ : \qquad \Delta\varphi(x,z) = -\frac{V_1 w}{\hbar v_{zi}}\,(1+\cos 2k_L x)\,. \tag{8.25}$$

La fonction d'onde atomique est donc spatialement modulée en phase, de sorte que la figure de diffraction est donnée par les fonctions de BESSEL de l'équation (8.19).

Nous avons donc montré que l'approximation de RAMAN–NATH est la transposition de l'approche du réseau de phase mince de l'optique :

- elle s'inscrit dans un cadre semi-classique (équivalent à l'optique géométrique) où la longueur d'onde atomique est petite par rapport aux échelles caractéristiques du réseau de diffraction,

- et elle obtient la phase de la fonction d'onde atomique en intégrant le potentiel dipolaire du réseau le long des trajectoires rectilignes que l'atome suivrait en absence du réseau.

Dans le paragraphe suivant, nous examinons les conditions de validité de l'approximation de RAMAN–NATH. La formulation présente du calcul de la figure de diffraction, à l'aide de l'équation de SCHRÖDINGER, mettra alors en évidence que l'approximation du réseau de phase mince est une approche plus limitée que l'optique géométrique, dans la mesure où ce sont les trajectoires rectilignes (non perturbées) qui servent à calculer la phase atomique.

[4] *Handbook of Mathematical Functions*, édité par M. ABRAMOWITZ et I. STEGUN, formules 9.1.44 et 9.1.45.

8.2.3 La validité de l'approximation de RAMAN–NATH

Rappelons que l'approximation de RAMAN–NATH consiste à négliger l'énergie cinétique transverse dans l'équation de SCHRÖDINGER. Le système d'équations (8.12) pour les amplitudes $b_n(z)$ montre que cette approximation est justifiée si deux conditions son remplies :

1. L'énergie cinétique transverse est négligeable devant la hauteur du potentiel dipolaire
$$4n^2 E_{\text{rec}} \ll V_1. \tag{8.26}$$
Nous nous sommes restreints ici à la zone d'interaction où le profil $f(z)$ est de l'ordre de l'unité parce qu'il n'est pas nécessaire de faire d'approximations pour décrire le mouvement libre en dehors de l'onde stationnaire.

2. Le facteur de phase de l'amplitude $b_n(z)$ associé à l'énergie cinétique transverse, $\exp(-4\mathrm{i}n^2 E_{\text{rec}} z/\hbar v_{zi})$, peut être négligé sur la longueur d'interaction, c'est-à-dire
$$4n^2 \frac{E_{\text{rec}}\, w}{\hbar v_{zi}} \ll 1. \tag{8.27}$$

Pour interpréter ces conditions, nous allons nous placer dans le régime où plusieurs ordres sont peuplés dans la figure de diffraction. L'ordre maximal n_{max} présent dans la figure de diffraction est alors approximativement donné par l'indice de modulation u_{KD}. En utilisant l'expression (8.18) pour u_{KD}, la première condition (8.26) peut être écrite sous la forme
$$\frac{2k_L^2 V_1}{M} \tau_{\text{int}}^2 \ll 1, \tag{8.28}$$
où $\tau_{\text{int}} \equiv w/v_{zi}$ est le temps-type d'interaction. En observant que la quantité $F_{\text{max}} \simeq 2k_L V_1$ est la valeur maximale de la force transverse qu'exerce le potentiel dipolaire (8.7) sur l'atome, nous constatons que le membre gauche de l'équation (8.28) fait intervenir la quantité $\Delta x_{\text{max}} \simeq \frac{1}{2} F_{\text{max}} \tau_{\text{int}}^2/M$, égale au déplacement maximal de l'atome dû à cette force. La condition (8.28) impose donc que celui-ci soit négligeable devant la période du réseau
$$2k_L \Delta x_{\text{max}} \ll 1. \tag{8.29}$$
Cette condition est équivalente au critère (8.4) d'un déplacement transverse négligeable devant le pas du réseau que nous avons trouvé pour le réseau de phase mince en optique.

En comparant les conditions (8.26) et (8.27), nous constatons que la deuxième est plus contraignante par un facteur $V_1 w/\hbar v_{zi} = u_{\text{KD}} \simeq n_{\text{max}}$. En exprimant cette condition en fonction du déplacement de l'atome, on obtient donc
$$2n_{\text{max}} k_L \Delta x_{\text{max}} \ll 1. \tag{8.30}$$

L'échelle caractéristique pour le déplacement de l'atome n'est alors pas la période $\lambda_L/2$ du réseau, mais la fraction $\lambda_L/2n_{\text{max}}$. Pour interpréter ceci, nous rappelons

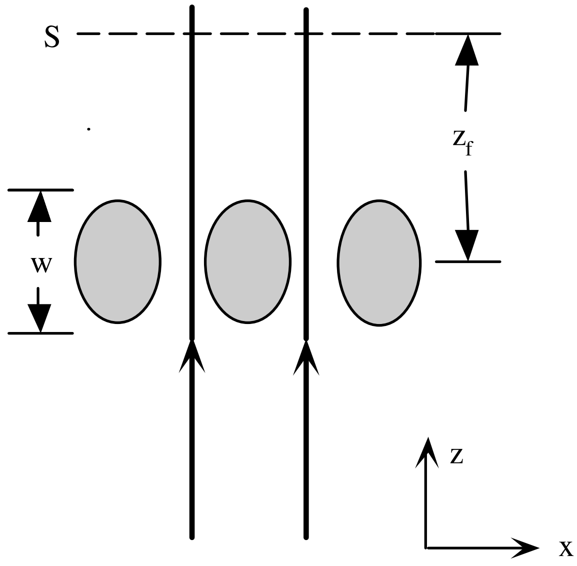

Figure 8.3: La phase atomique calculée à l'aide de trajectoires classiques dans l'approximation de RAMAN–NATH. *A partir de la surface $\mathcal{S}$, située à une distance z_f en aval de l'onde stationnaire, la fonction d'onde est propagée en utilisant l'équivalent du principe de* HUYGHENS–FRESNEL.

que la quantité du membre gauche de l'inégalité (8.30) représente la phase atomique $k_{xf}\Delta x_{\max}$ pour un vecteur d'onde diffracté $k_{xf} = 2n_{\max}k_L$ et un déplacement $\Delta x_{\max}$. L'approximation de RAMAN–NATH qui ignore le mouvement transverse de l'atome est valable si cette phase est négligeable devant l'unité.

Les équations (8.12) permettent de donner une interprétation alternative de l'approximation de RAMAN–NATH : nous notons que l'erreur $\delta\varphi_n(z)$ sur la phase de l'amplitude $b_n(z)$ augmente proportionnellement avec la distance z,

$$\delta\varphi_n(z) = -\frac{4n^2 E_{\mathrm{rec}}}{\hbar v_{zi}} z = -\frac{2n^2 k_L^2}{k_{zi}} z. \tag{8.31}$$

Cette quantité correspond à la différence de phase entre l'onde incidente et l'onde diffractée, car dans la limite où les vecteurs d'onde incident k_{zi} et diffractés k_{zn} sont grands devant le vecteur d'onde optique k_L, leur différence vaut

$$k_{zn} - k_{zi} = \sqrt{k_{zi}^2 - 4n^2 k_L^2} - k_{zi} \approx -\frac{2n^2 k_L^2}{k_{zi}} \tag{8.32}$$

de sorte que l'erreur de phase (8.31) est égale à $\delta\varphi_n(z) \approx (k_{zn} - k_{zi})\, z$. L'approximation de RAMAN-NATH, qui néglige le déphasage $\delta\varphi_n(z)$, ne tient donc pas correctement compte des vecteurs d'onde des ondes diffractées. Au sens strict, l'on ne peut s'en servir dans la limite $z \to +\infty$ pour calculer le champ à l'infini.

Cet inconvénient ne présente néanmoins pas une entrave majeure lorsque le calcul de RAMAN et NATH permet de trouver la fonction d'onde atomique juste après le réseau de diffraction, sur une surface $\mathcal{S}$ située à une distance $z = z_f$ (voir la figure 8.3). Pour calculer la fonction d'onde à l'infini, nous pouvons alors nous servir de l'équivalent quantique du principe de HUYGHENS–FRESNEL qui permet de propager la fonction d'onde dans l'espace libre à partir des valeurs qu'elle prend sur la surface $\mathcal{S}$. Pour que l'on puisse décrire la fonction d'onde atomique jusqu'à la surface $\mathcal{S}$ à l'aide de l'approximation de RAMAN–NATH, il est nécessaire que l'on puisse placer la surface avant que les « vraies » trajectoires atomiques ne se croisent, parce que l'approche semi-classique deviendrait alors invalide à cause des caustiques de la fonction d'onde. Comme nous l'avons vu pour le réseau de phase optique [les régimes équivalents (8.4) et (8.6)], les trajectoires se croisent en-dehors de la zone d'interaction, si et seulement si leur déplacement $\Delta x_{\max}$ dans le réseau est faible devant la période du réseau. C'est cette condition que nous avons trouvée à l'équation (8.29). Elle est nécessaire, mais non pas suffisante, car il faut en plus que les erreurs de phase $\delta\varphi_n(z)$ (8.31) soient petites devant l'unité à la position z_f de la surface $\mathcal{S}$,

$$|\delta\varphi_n(z_f)| \simeq \frac{2n^2 k_L^2}{k_{zi}} z_f \ll 1, \tag{8.33}$$

pour que les phases des amplitudes de diffraction soient correctes. En choisissant z_f de l'ordre de la longueur d'interaction w, nous trouvons que cette condition est précisément ce qu'exprime l'équation (8.27).

8.2.4 Conclusion

Nous avons montré que l'approximation de RAMAN–NATH pour la diffraction d'atomes par une onde stationnaire progresive est équivalente à l'approximation du réseau de phase mince de l'optique lumineuse : elle s'inscrit dans un cadre semi-classique où la longueur d'onde de DE BROGLIE est petite par rapport aux échelles caractéristiques du réseau, et pour calculer la phase atomique, elle se sert des trajectoires rectilignes que l'atome suivrait en absence de l'onde stationnaire. L'étude de la validité de l'approximation de RAMAN–NATH montre qu'elle est sujette à deux conditions. La première limite le déplacement transverse de l'atome à l'intérieur du réseau à une période. Une formulation équivalente de cette condition est que les trajectoires se croisent loin derrière le réseau, ce qui assure que l'on peut calculer la figure de diffraction de façon semi-classique. La deuxième condition de validité porte sur l'erreur de phase que l'on fait en calculant la phase atomique le long des trajectoires rectilignes. Pour une figure de diffraction où un grand nombre d'ordres sont présents, cette condition limite le déplacement transverse de l'atome à une fraction de la période du réseau.

8.3 La diffraction d'atomes par un réseau de phase mince

Nous présentons maintenant d'un point de vue assez général la théorie de la diffraction d'atomes dans l'approximation du réseau de phase mince. Au paragraphe 8.3.1, nous rappelons d'abord le calcul semi-classique de la fonction d'onde à l'aide de l'intégrale de chemins de FEYNMAN. Cette approche consiste à calculer la phase de la fonction d'onde à l'aide de l'intégrale d'action le long d'une trajectoire classique. Elle est valable pour une longueur d'onde atomique petite par rapport aux échelles spatiales caractéristique d'un potentiel donné, en analogie à l'optique géométrique, et généralise l'approximation de BRILLOUIN, KRAMERS et WENTZEL (l'approximation «BKW») à un nombre arbitraire de dimensions.

Nous prenons ensuite l'approche BKW généralisée comme point de départ pour effectuer un développement perturbatif de la phase atomique dans une situation où la diffraction est due à un potentiel faible (paragraphe 8.3.2). Par analogie à l'optique lumineuse, nous appelerons ce développement perturbatif l'«approximation du réseau de phase mince». En effet, le développement perturbatif montre que que l'on peut tenir compte de l'effet du potentiel faible en calculant la phase atomique le long des trajectoires classiques que l'atome suivrait en absence de perturbation. Cette approche permet de retrouver les résultats de l'approximation de RAMAN–NATH dans un cas particulier où les trajectoires non perturbées sont rectilignes. Au paragraphe (8.3.3), nous étudions la validité du développement perturbatif de la phase atomique, et nous en comparons les conditions de validité à celles de l'approximation de RAMAN–NATH.

Le principe général du calcul ne sera que résumé ici ; pour plus de détails, le lecteur consultera l'article «*Atomic diffraction by a thin phase grating*» reproduit à l'annexe 8.A.

8.3.1 Formulation dans l'esprit de l'optique géométrique

Si la longueur d'onde atomique est petite par rapport aux échelles spatiales d'un potentiel donné, l'on montre à partir de l'intégrale de chemins de FEYNMAN que l'on peut calculer la fonction d'onde atomique en utilisant l'intégrale d'action le long de trajectoires classiques (voir [69, 71, 72] et aussi au chapitre 1.2). Pour une formulation plus précise, plaçons-nous dans une situation où l'atome interagit avec un potentiel localisé dans l'espace. Nous considérons qu'à l'instant t_i, la fonction d'onde est une onde plane incidente dans la région asymptotique où le potentiel s'annule,

$$\psi(\mathbf{r}, t_i) = \exp(\mathrm{i}\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}). \tag{8.34}$$

A l'instant t_f après l'interaction, l'approximation semi-classique de la fonction d'onde à la position $\mathbf{r}_f$ dans la région asymptotique est alors donnée par [voir (1.64)]

$$\psi(\mathbf{r}_f, t_f) = A \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S(\mathbf{r}_f, t_f|\mathbf{v}_i, t_i)\right], \tag{8.35}$$

où l'action S est égale à (1.45)

$$S(\mathbf{r}_f, t_f|\mathbf{v}_i, t_i) = M\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{r}(t_i) + \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t\, L[\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t), t]\,. \tag{8.36}$$

Dans cette expression, $L(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ est le Lagrangien qui détermine les équations du mouvement classiques. La trajectoire classique $\mathbf{r}(t)$ satisfait aux conditions suivantes : sa vitesse à l'instant initial t_i vaut $\mathbf{v}_i = \hbar\mathbf{k}_i/M$, et elle aboutit à la position $\mathbf{r}_f$ à l'instant final t_f. Le facteur de normalisation A de la fonction d'onde (8.35) est donné par[5]

$$A = \sqrt{\frac{\mathrm{d}\Sigma_i}{\mathrm{d}\Sigma_f}}, \tag{8.37}$$

où $\mathrm{d}\Sigma_{i,f}$ sont les sections d'un « pinceau » de trajectoires classiques aux instants initial et final, ce pinceau étant centré sur la trajectoire $\mathbf{r}(t)$.

Ayant ainsi calculé la fonction d'onde atomique après l'interaction avec le potentiel, on obtient son expression à l'infini en utilisant le théorème de HELMHOLTZ et KIRCHHOFF[6] qui est une version élaborée du principe de HUYGHENS–FRESNEL. Il permet de calculer la fonction d'onde à une position $\mathbf{r}$ dans l'espace libre à partir de ses valeurs et celles de sa dérivée normale sur une surface $\mathcal{S}$ fermée qui est située dans l'espace libre après la zone d'interaction :

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi}\int_{\mathcal{S}} \mathrm{d}\mathcal{S}\, \mathbf{n}_f \cdot [\psi(\mathbf{r}_f)\nabla_f G_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}) - G_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r})\nabla_f \psi(\mathbf{r}_f)]\,. \tag{8.38}$$

Dans cette expression, $G_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r})$ est la fonction de GREEN dans l'espace libre pour l'énergie $E = \hbar^2\mathbf{k}_i^2/2M$ [donnée à l'équation (**ADif** B.3)]. Le point $\mathbf{r}_f$ se trouve sur la surface $\mathcal{S}$ dont $\mathbf{n}_f$ est le vecteur normal unitaire orienté vers l'extérieur, et ∇_f est le gradient par rapport à $\mathbf{r}_f$.

Pour un réseau périodique dans la direction Ox (avec période a) et invariant par translation dans la direction Oy, on montre alors [équations (**ADif** B.5–11)] que la fonction d'onde à l'infini est une somme discrète d'ondes diffractées comme au développement (7.12),

$$\mathbf{r} \to \infty \ : \quad \psi(\mathbf{r}) = \sum_n a_n \exp(\mathrm{i}k_{xn}x + \mathrm{i}k_{zn}z), \tag{8.39}$$

et que les amplitudes de diffraction a_n sont données par l'intégrale

$$a_n = \int_0^a \frac{\mathrm{d}x_f}{2a}\left(1 + \frac{Mv_{zf}(x_f, z_f)}{\hbar k_{zn}}\right)\psi(x_f, z_f)\exp(-\mathrm{i}k_{xn}x_f - \mathrm{i}k_{zn}z_f)\,, \tag{8.40}$$

[5] M. BORN et E. WOLF, *Principles of Optics* (6e édition 1980), chap. 3.1.2; A. MESSIAH, *Mécanique Quantique* (nouvelle édition 1995), chap. VI, § 4.

[6] M. NIETO-VESPERINAS, *Scattering and Diffraction in Physical Optics*, chap. 1.6.3 ; BORN et WOLF, *op. cit.*, chap. 8.3.

où $v_{zf}(x_f, z_f)$ est la composante de vitesse le long de l'axe Oz de la trajectoire classique qui aboutit à la position finale (x_f, z_f). Le facteur en parenthèses du membre droit de (8.40) tient compte de l'inclinaison des trajectoires classiques par rapport à la surface d'intégration. Nous notons qu'il est l'analogue du facteur d'obliquité du principe de HUYGHENS–FRESNEL de l'optique.[7] Dans une situation où les trajectoires classiques et les ondes diffractées s'écartent peu de l'axe Oz, il est approximativement constant. Les amplitudes de diffraction sont alors données par la transformée de FOURIER de la fonction d'onde $\psi(x_f, z_f)$ par rapport à x_f.

Remarque 1. Nous avons fait le choix de calculer la fonction d'onde finale $\psi(\mathbf{r}_f, t_f)$ (8.35) en représentation position, à partir d'une onde plane incidente au vecteur d'onde $\mathbf{k}_i$. Ce choix n'est pas le seul possible. D'une part, il diffère de la présentation habituelle de l'intégrale de FEYNMAN [69, 71, 72], où l'on calcule la propagation de la fonction d'onde à partir d'une position initiale $\mathbf{r}_i$ fixée vers une position finale $\mathbf{r}_f$. Nous avons étudié le lien entre ces deux formulations au paragraphe 1.2.2. D'autre part, l'on peut choisir des conditions initiales et finales dans l'espace des vitesses et calculer l'action le long d'une trajectoire dont la vitesse initiale vaut $\mathbf{v}_i = \hbar\mathbf{k}_i/M$ et la vitesse finale $\mathbf{v}_n = \hbar\mathbf{k}_n/M$ où $\mathbf{k}_n$ est un vecteur d'onde diffracté. Cette approche revient à calculer directement les amplitudes de diffraction parce qu'elle incorpore la transformée de FOURIER (par rapport à la position $\mathbf{r}_f$) de la fonction d'onde finale $\psi(\mathbf{r}_f, t_f)$. L'action $S(\mathbf{v}_n, t_f|\mathbf{v}_i, t_i)$ contient alors un autre terme supplémentaire $-M\mathbf{v}_n \cdot \mathbf{r}(t_f)$ par rapport à (8.36). Cependant, cette approche se complique lorsque la vitesse diffractée $\mathbf{v}_n$ se trouve en dehors de la distribution classique de vitesse finale parce qu'il n'existe pas de trajectoire classique qui satisfasse aux conditions asymptotiques imposées. Il faut alors faire intervenir des trajectoires complexes [107, 75, 112]. Ceci est évité dans l'approche que nous avons choisie : il est généralement possible de trouver une trajectoire classique réelle pour calculer l'action $S(\mathbf{r}_f, t_f|\mathbf{v}_i, t_i)$, à condition de calculer les amplitudes de diffraction par l'intégrale (8.40). Les trajectoires complexes apparaîtraient si l'on calculait cette intégrale par la méthode de la phase stationnaire.

Remarque 2. Si le Lagrangien $L = L(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ ne dépend pas explicitement du temps, l'énergie est conservée. Le long de la trajectoire classique $\mathbf{r}(t)$, nous pouvons alors écrire le Lagrangien sous la forme (1.40)

$$\begin{aligned} L[\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t)] &= \mathbf{p}(t) \cdot \mathbf{v}(t) - H[\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)] \\ &= \mathbf{p}(t) \cdot \mathbf{v}(t) - E, \end{aligned} \tag{8.41}$$

où $\mathbf{p}(t)$ est l'impulsion et $H[\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)]$ le Hamiltonien classique. Le long de la trajectoire $\mathbf{r}(t)$, le Hamiltonien est constant et égal à l'énergie totale $E = \frac{1}{2}M\mathbf{v}_i^2$. L'intégrale dans l'action (8.36) prend donc la forme

$$\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t\, L[\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t)] = \int_{\mathbf{r}(t_i)}^{\mathbf{r}_f} \mathbf{dr} \cdot \mathbf{p}(\mathbf{r}) - E(t_f - t_i). \tag{8.42}$$

La dépendance temporelle de l'action (8.36) se réduit alors à $-E(t_f - t_i)$, et en séparant ce terme de l'action, l'on obtient la fonction d'onde stationnaire.

[7] BORN et WOLF, *op. cit.*, chap.8.2.

8.3.2 Calcul perturbatif de l'action

Pour effectuer le calcul semi-classique de la fonction d'onde que nous venons de présenter, il est nécessaire de résoudre les équations classiques du mouvement pour trouver la trajectoire $\mathbf{r}(t)$. Dans la pratique, ceci demande souvent une solution numérique et nous en présentons un exemple à la fin du paragraphe suivant (au paragraphe 8.4.7). Nous montrons ici, en suivant C. COHEN-TANNOUDJI [71, 72], que dans une situation où la diffraction est due à un potentiel $\epsilon V_1(\mathbf{r})$ «faible»[8], il est possible par un développement de l'action de rendre compte de l'influence du potentiel $\epsilon V_1(\mathbf{r})$ sans qu'il faille connaître les trajectoires classiques perturbées par ce dernier.

Nous supposons donc que le Lagrangien qui détermine le mouvement de l'atome est de la forme

$$L(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = L_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}) - \epsilon V_1(\mathbf{r}). \tag{8.43}$$

Le potentiel $\epsilon V_1(\mathbf{r})$ présente une modulation spatiale et est à l'origine de la diffraction.[9] Le Lagrangien $L_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ n'est pas modulé et décrit le mouvement de l'atome en absence du réseau de diffraction. A titre d'exemple, la diffraction d'atomes par un réseau de lumière en transmission (l'effet KAPITZA–DIRAC) correspond à un Lagrangien non perturbé libre, $L_0 = \frac{1}{2} M \mathbf{v}^2$, et un potentiel perturbateur identique au potentiel dipolaire $V_{\mathrm{KD}}(x, z)$ (8.7) de l'onde stationnaire lumineuse. Pour l'onde évanescente stationnaire, nous identifierons $\epsilon V_1(\mathbf{r})$ avec la partie modulée du potentiel dipolaire, proportionnelle au contraste du réseau. Il est à noter que dans ce cas, le Lagrangien $L_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ ne se réduit pas à la seule énergie cinétique, mais contient le potentiel dipolaire non modulé. (L'on aurait un potentiel analogue dans l'effet KAPITZA–DIRAC, si les intensités des deux ondes lumineuses qui forment le réseau de lumière étaient différentes.)

Nous montrons à l'annexe 8.A par un développement perturbatif de l'action et des trajectoires classiques en puissances du paramètre ϵ (les exposants (0), (1), (2) donnent l'ordre dans le développement),

$$S = S^{(0)} + S^{(1)} + S^{(2)} + \cdots \tag{8.44a}$$

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}^{(0)}(t) + \mathbf{r}^{(1)}(t) + \mathbf{r}^{(2)}(t) + \cdots \tag{8.44b}$$

que l'effet du potentiel perturbateur à l'ordre le plus bas est de modifier l'action par une quantité $S^{(1)}$ donnée par[10]

$$S^{(1)}(\mathbf{r}_f, t_f | \mathbf{v}_i, t_i) = -\epsilon \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \, V_1\Big[\mathbf{r}^{(0)}(t)\Big]\,. \tag{8.45}$$

[8] Nous reviendrons au paragraphe 8.3.3 à une formulation précise de cette condition.

[9] Au chapitre 12, nous étudions un exemple où le Lagrangien L_0 est perturbé par un potentiel modulé temporellement $\epsilon V_1(\mathbf{r}, t)$.

[10] Au chapitre 12, nous présentons une démonstration alternative de l'expression (8.45), en partant de l'équation de SCHRÖDINGER.

Ce résultat nous montre que le potentiel perturbateur change la phase de la fonction d'onde par un déphasage $\Delta\varphi^{(1)} = S^{(1)}/\hbar$ que l'on obtient en intégrant le potentiel perturbateur le long de la trajectoire classique *non perturbée* $\mathbf{r}^{(0)}(t)$ que l'atome suivrait en absence de perturbation (pour $\epsilon = 0$). En généralisant l'analogie à l'optique lumineuse, nous définissons dans ce mémoire *l'approximation du réseau de phase mince* par ce calcul perturbatif.

Nous pouvons démontrer le résultat (8.45) par le principe de moindre action : rappelons que ce principe implique que l'intégrale d'action calculée le long d'une trajectoire quelconque dont l'écart par rapport à la trajectoire classique est de l'ordre d'une petite quantité ϵ, ne diffère qu'à l'ordre ϵ^2 de l'action pour la trajectoire classique. Or, comme la « vraie » trajectoire $\mathbf{r}(t)$ est celle qui tient compte du potentiel $\epsilon V_1(\mathbf{r})$, elle diffère de la trajectoire non perturbée $\mathbf{r}^{(0)}(t)$ par un écart proportionnel à ϵ, au moins dans la limite perturbative $\epsilon \ll 1$. Jusqu'au premier ordre en ϵ inclus, nous trouvons donc l'action en intégrant le Lagrangien L le long de $\mathbf{r}^{(0)}(t)$. Comme par ailleurs la seule différence entre L et L_0 est le potentiel perturbateur $-\epsilon V_1(\mathbf{r})$, la modification de l'action par la perturbation est bien donnée par l'intégrale (8.45).

Dans le cas de l'effet KAPITZA–DIRAC, les trajectoires non perturbées $\mathbf{r}^{(0)}(t)$ sont rectilignes et l'expression (8.45) donne un déphasage $\Delta\varphi = S^{(1)}/\hbar$ identique au résultat (8.22) que nous avons obtenu à l'aide de l'approximation de RAMAN–NATH au paragraphe précédent. Nous constatons donc que l'approximation de RAMAN–NATH est un cas particulier de l'approche du réseau de phase mince lorsque le Lagrangien L_0 non perturbé se réduit à la seule énergie cinétique. D'autre part, le présent cadre perturbatif montre que l'approximation du réseau de phase mince permet de décrire des situations plus générales où les trajectoires non perturbées sont déjà modifiées par un potentiel dans le Lagrangien L_0. En particulier, nous pouvons nous en servir pour caractériser la diffraction d'atomes par une onde évanescente stationnaire, où les trajectoires atomiques sont réfléchies par le potentiel, même en absence d'une composante stationnaire dans l'onde évanescente.

Remarque. La formulation présente de l'approximation du réseau de phase mince permet de généraliser aisément l'approximation de RAMAN–NATH à la diffraction d'atomes par une onde stationnaire en incidence oblique [111] : il suffit d'intégrer le potentiel dipolaire $V_{\mathrm{KD}}(x, z)$ le long de la trajectoire qui traverse le réseau sous l'angle d'incidence θ_i. On obtient alors un déphasage

$$\Delta\varphi^{(1)} = u_{\mathrm{KD}}\left(1 + \beta_{\mathrm{KD}} \cos 2k_L x_{\mathrm{tr}}\right), \tag{8.46}$$

où x_{tr} est la position où la trajectoire traverse le plan de symétrie $z = 0$. Si l'onde stationnaire a un profil d'intensité gaussien de largeur w à e^{-2}, le facteur d'obliquité β_{KD} pour l'effet KAPITZA–DIRAC est donné par

$$\beta_{\mathrm{KD}} = \exp\left[-\tfrac{1}{2}\left(k_L w \tan\theta_i\right)^2\right]. \tag{8.47}$$

Par analogie au facteur d'obliquité β pour l'onde évanescente stationnaire, la quantité β_{KD} fait décroître l'amplitude de la modulation de phase, $u_{\mathrm{KD}}\beta_{\mathrm{KD}}$, lorsque l'on s'éloigne de l'incidence normale. Cette décroissance est très rapide dans le cas générique où l'épaisseur w de l'onde stationnaire est beaucoup plus grande que la longueur d'onde optique $2\pi/k_L$.

8.3.3 Conditions de validité

Rappelons tout d'abord que l'approximation du réseau de phase mince est une approche semi-classique puisqu'elle se sert des trajectoires classiques pour calculer la phase de la fonction d'onde. Elle nécessite donc que la longueur d'onde atomique soit petite par rapport aux échelles de variation des potentiels dans le Lagrangien. En outre, il faut que les trajectoires classiques ne se croisent pas à l'intérieur de la zone d'interaction parce que sinon des caustiques seraient présentes dans la fonction d'onde et l'approche semi-classique ne serait plus valable.

Ensuite, dans l'approximation du réseau de phase mince, nous calculons l'action de façon perturbative par un développement en puissances de ϵ. Nous obtenons un critère de validité pour ce développement en étudiant le terme d'ordre deux $S^{(2)}$: d'une part, le déphasage atomique est donné par $\Delta\varphi^{(1)} = S^{(1)}/\hbar$ avec une précision suffisante si l'action à l'ordre deux est petite par rapport à la constante de PLANCK :

$$|S^{(2)}| \ll \hbar. \tag{8.48}$$

D'autre part, pour que le développement perturbatif soit valable, il faut que $S^{(2)}$ soit petit devant l'action au premier ordre :

$$|S^{(2)}| \ll |S^{(1)}|. \tag{8.49}$$

Nous notons que la première de ces conditions est plus restrictive si l'action $S^{(1)}$ au premier ordre est supérieure à $\hbar$. Puisque le déphasage $\Delta\varphi^{(1)}$ est alors supérieur à l'unité, nous appelerons ce régime celui d'une *modulation de phase forte*. Dans les paragraphes précédents, nous avons constaté que pour une modulation de phase sinusoïdale, des ordres supérieurs apparaissent alors dans la figure de diffraction, jusqu'à un ordre maximal $n_{\max}$ avec

$$n_{\max} \sim S^{(1)}/\hbar. \tag{8.50}$$

Pour un critère de validité plus quantitatif, considérons de nouveau un réseau de diffraction dans le plan xOz et invariant par translation dans la direction Oy. Aux équations (**ADif** 7, 8), nous démontrons alors l'estimation suivante pour l'action à l'ordre deux

$$|S^{(2)}| \lesssim \frac{M}{2} \left(\Delta v_x^{\max} \Delta x_{\max} + \Delta v_z^{\max} \Delta z_{\max} \right), \tag{8.51}$$

où $\Delta v_{x,z}^{\max}$ sont les transferts de vitesse classiques maximaux (en valeur absolue) et $\Delta x_{\max}, \Delta z_{\max}$ les déplacements maximaux par rapport à la trajectoire non perturbée $\mathbf{r}^{(0)}(t)$.

Ecrivons la condition de validité (8.48) d'abord sous la forme d'une limite pour le temps d'interaction τ_{int}. En notant que les déplacements $\Delta x_{\max}$ et $\Delta z_{\max}$ sont de l'ordre de $\Delta v_{x,z}^{\max}\tau_{\text{int}}$, nous obtenons

$$\frac{|S^{(2)}|}{\hbar} \lesssim \frac{M}{2\hbar}\left[(\Delta v_x^{\max})^2 + (\Delta v_z^{\max})^2\right]\tau_{\text{int}} \ll 1. \tag{8.52}$$

Pour interpréter cette condition, nous observons que dans l'approche perturbative, l'énergie est seulement conservée au premier ordre[11] par rapport au paramètre ϵ ; au premier ordre, ceci implique la relation suivante pour la vitesse finale :

$$\mathbf{v}_f^{(0)} \cdot \mathbf{v}_f^{(1)} = 0, \tag{8.53}$$

alors qu'au deuxième ordre en ϵ, l'on trouve un «défaut d'énergie» $\delta E_{\text{cin}}^{(2)}$ donné par

$$\delta E_{\text{cin}}^{(2)} = \frac{M}{2}\left[\left(\mathbf{v}_f^{(0)} + \mathbf{v}_f^{(1)}\right)^2 - \left(\mathbf{v}_f^{(0)}\right)^2\right] \approx \frac{M}{2}\left(\mathbf{v}_f^{(1)}\right)^2. \tag{8.54}$$

A ce défaut d'énergie est associée une erreur de phase

$$\delta\varphi^{(2)} = -\frac{1}{\hbar}\delta E_{\text{cin}}^{(2)}\tau_{\text{int}}, \tag{8.55}$$

et nous constatons que la condition de validité (8.52) pour l'approximation du réseau de phase mince impose que cette erreur soit inférieure à l'unité. Cette condition précise à partir de quel temps d'interaction le réseau est «mince».

L'estimation (8.51) nous permet également de déduire une limite pour le déplacement Δx de l'atome dans le réseau de diffraction. A cet effet, nous notons que pour une figure de diffraction où les ordres jusqu'à $|n| \lesssim n_{\max}$ sont peuplés, la valeur maximale du transfert de vitesse horizontal vaut

$$\Delta v_x^{\max} = n_{\max}\frac{2\hbar q}{M}, \tag{8.56}$$

où $a = \pi/q$ est la période du réseau le long de la direction Ox. D'autre part, la conservation d'énergie au premier ordre (8.53) donne un transfert vertical maximal

$$\Delta v_z^{\max} \approx \tan\theta_i\,\Delta v_x^{\max}, \tag{8.57}$$

où l'angle θ_i donne la direction finale de la trajectoire non perturbée dans le plan xOz. L'action $S^{(2)}$ (8.51) est donc petite devant $\hbar$ si la condition suivante est remplie :

$$\frac{|S^{(2)}|}{\hbar} \lesssim q\,n_{\max}\,(\Delta x_{\max} + \tan\theta_i\,\Delta z_{\max}) \ll 1. \tag{8.58}$$

En incidence normale, nous avons $\theta_i = 0$ et nous retrouvons ici le même critère de validité que pour l'approximation de RAMAN-NATH [l'équation (8.30)], à savoir que

[11] Pour le démontrer, il suffit de développer les équations du mouvement jusqu'à l'ordre deux en ϵ.

le déplacement transverse $\Delta x_{\max}$ soit inférieur à la fraction $a/n_{\max}$ du pas du réseau. Ceci confirme que les approximations de RAMAN-NATH et du réseau de phase mince sont des approches équivalentes. En incidence oblique ou rasante, le deuxième terme dans (8.58) rend cette condition de validité plus stricte : un faible écart $\Delta z_{\max}$ de la trajectoire non perturbée dans la direction normale implique alors un écart $\tan\theta_i\,\Delta z_{\max}$ beaucoup plus grand parallèle au pas du réseau. Nous verrons pour l'exemple de la diffraction par l'onde évanescente stationnaire que l'approche du réseau de phase mince n'est en effet plus valable en incidence rasante.

Notons pour finir que les deux approximations équivalentes, celle de RAMAN–NATH et du réseau de phase mince, sont plus restreintes que l'approche BKW généralisée parce que celle-ci n'est sujette qu'à la condition qu'il n'y ait pas de caustiques à l'intérieur de la zone d'interaction, ce qui est équivalent à un déplacement faible devant la période a du réseau (voir au paragraphe 8.1). En fait, c'est cette condition plus faible qu'exprime le deuxième critère de validité (8.49) : avec (8.50) et (8.58), nous avons en effet

$$\frac{|S^{(2)}|}{|S^{(1)}|} \lesssim q\,(\Delta x_{\max} + \tan\theta_i\,\Delta z_{\max}) \ll 1, \tag{8.59}$$

où l'échelle pour le déplacement $\Delta x_{\max}$ est la période a du réseau.

8.3.4 Expression simplifiée pour les amplitudes de diffraction

Une fois le déphasage au premier ordre $\Delta\varphi^{(1)}(x_f, z_f) = S^{(1)}(x_f, z_f)/\hbar$ déterminé, nous disposons d'une expression approchée pour la fonction d'onde à la position z_f en aval de la région d'interaction [voir (8.35)] :

$$\psi(x_f, z_f) \approx A(x_f, z_f)\,\exp\mathrm{i}\left[\varphi^{(0)}(x_f, z_f) + \Delta\varphi^{(1)}(x_f, z_f)\right], \tag{8.60}$$

où le facteur d'amplitude $A(x_f, z_f)$ est donné par (8.37) et $\varphi^{(0)} = S^{(0)}/\hbar$ est la phase de l'onde finale pour le Lagrangien L_0 non perturbé.

Pour calculer les amplitudes de diffraction, nous pouvons donc nous servir de l'intégrale (8.40) qui a été obtenue par l'analogue quantique du principe de HUYGHENS–FRESNEL [le théorème de HELMHOLTZ–KIRCHHOFF (8.38)]. Nous montrons cependant dans l'annexe 8.B que cette intégrale se simplifie, compte tenu des conditions de validité de l'approximation du réseau de phase mince. Plus précisément, le facteur d'amplitude $A(x_f, z_f)$ ainsi que le facteur d'obliquité de HUYGHENS–FRESNEL dans (8.40) peuvent être remplacés par des constantes. Pour un angle d'incidence modéré, les amplitudes de diffraction sont alors données par l'expression suivante

$$a_n^{(\mathrm{r.m.})} = \int_0^a \frac{\mathrm{d}x_f}{a}\,\exp\mathrm{i}\left[\varphi^{(0)}(x_f, z_f) + \Delta\varphi^{(1)}(x_f, z_f) - k_{xn}x_f - k_{zn}z_f\right], \tag{8.61}$$

où nous reconnaissons la transformée de FOURIER de la fonction d'onde déphasée par rapport à la coordonnée x_f parallèle au pas du réseau. Lorsque l'incidence devient rasante, le transfert de vecteur d'onde normal devient plus important, et il faut alors multiplier l'expression (8.61) par un facteur correctif donné à l'annexe 8.B.

Notons finalement que la phase $\varphi^{(0)}$ contribue seulement un facteur de phase constant aux amplitudes de diffraction parce qu'elle ne présente pas de modulation spatiale en fonction de x_f, étant calculée par rapport au Lagrangien L_0 non perturbé.

Les populations w_n. Les amplitudes de diffraction déterminent maintenant les populations des ordres dans la figure de diffraction. A l'annexe 8.B, nous montrons que dans l'approximation du réseau de phase mince et en dehors de l'incidence rasante, les populations sont simplement égales aux carrés des amplitudes de diffraction :

$$w_n^{(\mathrm{r.m.})} = |a_n^{(\mathrm{r.m.})}|^2. \tag{8.62}$$

Près de l'incidence rasante, par contre, il faut tenir compte du facteur supplémentaire k_{zn}/k_{zi} qui figure dans l'expression exacte (7.17).

8.3.5 Conclusion

En approximant l'intégrale de chemins de FEYNMAN dans le régime semi-classique par la méthode de la phase stationnaire, l'on peut calculer la fonction d'onde dans l'esprit de l'optique géométrique, à l'aide de l'intégrale d'action le long des trajectoires classiques. Dans le cas de l'interaction avec un potentiel faible, nous avons montré par un calcul perturbatif que l'influence de ce potentiel sur la fonction d'onde est caractérisée par un déphasage et que ce déphasage est obtenu en intégrant le potentiel perturbateur le long des trajectoires classiques que l'atome suivrait en absence de perturbation. La figure de diffraction à l'infini est ensuite obtenue par une transformée de FOURIER de la fonction d'onde déphasée. Par analogie à l'optique lumineuse, nous avons appelé cette approche l'approximation du réseau de phase mince. Pour un réseau de diffraction en transmission, elle permet de retrouver le déphasage donné par l'approximation de RAMAN–NATH, si le potentiel du réseau est une perturbation par rapport à l'énergie cinétique incidente ; les trajectoires non perturbées traversent alors le réseau de façon rectiligne. Mais l'approximation du réseau de phase mince permet également de décrire des situations où les trajectoires non perturbées ont une forme plus complexe. Ce cas se présente en particulier dans la diffraction par l'onde évanescente stationnaire.

Le domaine de validité de l'approximation du réseau de phase mince est délimité, d'une part, par le régime semi-classique et, d'autre part, par le calcul perturbatif de la phase atomique. Le réseau de diffraction est « mince » si le calcul de la phase le long des trajectoires non perturbées n'introduit pas des erreurs de phase qui soient supérieures à l'unité. En particulier, le développement perturbatif fait intervenir, au deuxième ordre, un défaut d'énergie cinétique et donc une erreur de phase qui augmente avec le temps d'interaction. En incidence normale, nous obtenons le même critère de validité que pour l'approximation de RAMAN–NATH, à savoir que l'atome se déplace peu dans la direction du pas du réseau, à une échelle donnée par une fraction $a/n_{\max}$ de la période où $n_{\max}$ est la largeur en ordres de la figure de diffraction.

8.4 Application à la diffraction d'atomes par l'onde évanescente stationnaire

Nous appliquons maintenant l'approximation du réseau de phase mince que nous venons d'esquisser de façon générale à la diffraction d'atomes par une onde évanescente stationnaire. Nous rappelons d'abord les conditions pour que cette approche semi-classique puisse être utilisée (paragraphe 8.4.1). Au paragraphe 8.4.2, nous suivons ensuite la démarche perturbative pour calculer l'action. C'est la partie modulée du potentiel dipolaire qui sera considérée comme une perturbation, et nous identifions le contraste de l'onde stationnaire au paramètre ϵ du développement perturbatif. L'action au premier ordre par rapport au contraste permet de calculer le déphasage de l'onde atomique réfléchie, et nous constatons que la diffraction est due à une modulation de phase de la fonction d'onde (paragraphes 8.4.3, 8.4.4). Dans le régime d'une modulation de phase faible, nous comparerons les amplitudes de diffraction aux résultats de l'approximation de BORN, ceci nous permet d'établir des conditions de validité pour l'approximation du réseau de phase mince à la limite perturbative (paragraphe 8.4.5). Pour une modulation de phase forte, un grand nombre d'ordres sont présents dans la figure de diffraction et nous montrons que son enveloppe est donnée par la distribution classique de vitesse (paragraphe 8.4.6). Finalement, au paragraphe 8.4.7, nous comparons l'approximation du réseau de phase mince à un calcul plus précis dans le régime semi-classique, à l'aide de l'approche BKW généralisée.

8.4.1 Cadre semi-classique

Nous établissons dans ce paragraphe les conditions pour que la diffraction d'atomes puisse être décrite par une approche semi-classique.

Il faut d'abord que la longueur d'onde de DE BROGLIE des atomes dans le plan xOz du réseau de diffraction soit petite par rapport aux échelles spatiales du potentiel dipolaire de l'onde évanescente stationnaire, c'est-à-dire son épaisseur $1/\kappa$ et sa période $a = \pi/q$. Dans l'approximation de BORN, nous avons étudié ce régime au paragraphe 7.3.

Nous avons vu ensuite dans des géométries en transmission que les trajectoires classiques permettent facilement de calculer la phase atomique si elles ne se croisent pas à l'intérieur du réseau, sinon des caustiques apparaîtraient dans la fonction d'onde. Pour préciser cette condition dans la présente géométrie en réflexion, nous allons nous servir des trajectoires classiques que nous avons obtenues au chapitre 6 sur le mouvement classique. Rappelons que le transfert de vitesse horizontal $\Delta v_x(x_{\rm reb})$ est donné par (6.11)

$$\Delta v_x(x_{\rm reb}) = \Delta v_x^{\max} \sin 2qx_{\rm reb} \tag{8.63}$$

et qu'il dépend de la position $x_{\rm reb}$ où la trajectoire classique rebrousse chemin. Le transfert de vitesse maximal vaut (6.25) :

$$\Delta v_x^{\max} = 2\epsilon \frac{q}{\kappa} v_{zi}\, \beta\Big(\frac{2q}{\kappa} \tan\theta_i\Big) , \tag{8.64}$$

où β est le facteur d'obliquité défini en (6.12). La figure 8.4 montre que les trajectoires qui rebroussement chemin autour d'un nœud de l'onde évanescente stationnaire ($x_{\rm reb} = (p + 1/2)a$, avec p un entier), se croisent à une distance $z_{\rm cau}$ au-dessus du réseau. On obtient cette distance en développant le transfert de vitesse (8.63) autour du nœud[12]

$$z_{\rm cau} = -v_{zf} \left(\left.\frac{\partial \Delta v_x}{\partial x_{\rm reb}}\right|_{x_{\rm reb}=a/2} \right)^{-1} \simeq \frac{\kappa}{4\epsilon q^2 \beta}. \tag{8.65}$$

La condition que les trajectoires se croisent dans la région asymptotique loin du réseau, $z_{\rm cau} \gg 1/\kappa$, est alors équivalente à

$$4\epsilon\beta \frac{q^2}{\kappa^2} \ll 1. \tag{8.66}$$

Comme la valeur maximale du facteur d'obliquité β est l'unité, cette condition est satisfaite si le réseau est géométriquement mince [voir la condition (6.29)].[13] C'est donc pour un tel réseau que l'approche semi-classique permet de caractériser la diffraction d'atomes.

Cependant, contrairement au cas d'une géométrie en transmission, il est inévitable qu'une surface caustique ne soit présente à l'intérieur du réseau parce que les atomes sont réfléchis par le réseau. Cette caustique correspond à l'enveloppe des points de rebroussement des trajectoires classiques (voir la figure 8.5), et l'approche semi-classique ne permet pas d'obtenir la fonction d'onde au voisinage de la caustique. A cet effet, il faudrait résoudre l'équation de SCHRÖDINGER, au moins de façon approchée [113]. Si par contre nous nous intéressons seulement à la phase atomique, l'optique lumineuse nous apprend qu'il suffit de la corriger d'un retard de phase $-\pi/2$ après

[12]Les trajectoires qui rebroussent chemin aux positions où le gradient horizontal est maximal se croisent à la position

$$z'_{\rm cau} \simeq v_{zi} \frac{\pi/4q}{\Delta v_x^{\max}} = \frac{\pi\kappa}{8\epsilon q^2 \beta},$$

qui se trouve plus loin que $z_{\rm cau}$ (8.65), par un facteur $\pi/2$.

[13]Rappelons qu'au paragraphe 6.2.1, nous avons introduit le régime du réseau géométriquement mince en imposant que l'atome se déplace peu dans la direction horizontale pendant la réflexion. Comme pour le réseau de phase optique du sous-chapitre 8.1, nous constatons donc de nouveau que cette condition est équivalente à celle que les caustiques se trouvent loin du réseau.

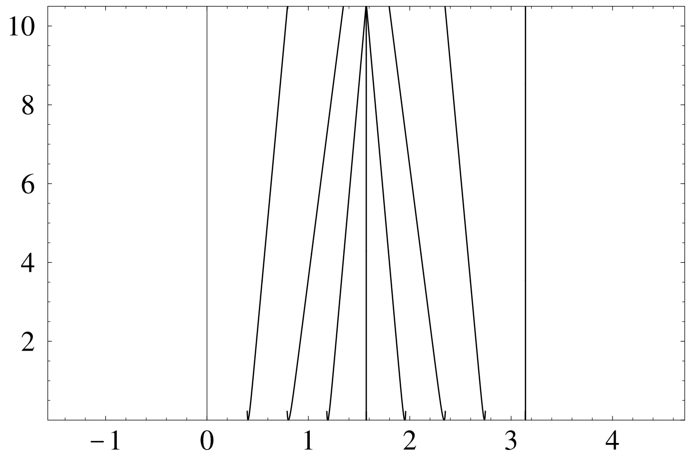

Figure 8.4: Croisements de trajectoires atomiques réfléchies par l'onde évanescente stationnaire, en incidence normale.

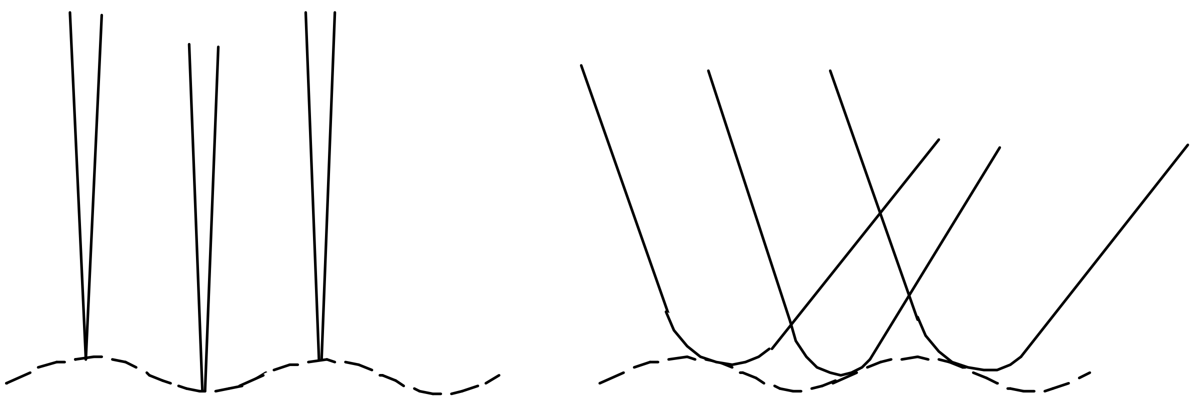

Figure 8.5: Surface caustique (tirets) formée par les trajectoires réfléchies par l'onde évanescente stationnaire.
A gauche : incidence normale, à droite : incidence oblique.

que la trajectoire (le rayon lumineux) a touché la caustique.[14] Nous notons que pour une situation à une dimension, la formule de raccordement de l'approximation BKW autour d'un point de rebroussement[15] correspond à la même correction de phase.

---

[14] LANDAU et LIFSCHITZ, *Klassische Feldtheorie*, 10e édition, chap. VII, § 59. BORN et WOLF, *op. cit.*, chap. 8.8.4.
Lors du passage à travers un foyer, la phase change de $-\pi$ parce que deux surfaces caustiques s'y confondent.

[15] MESSIAH, *op. cit.*, tome I, chap. VI, § 9.

8.4.2 Calcul du déphasage

Nous calculons maintenant le déphasage de la fonction d'onde atomique après la réflexion par l'onde évanescente stationnaire, en développant l'action par rapport au contraste ϵ de l'onde stationaire. Nous suivons donc la démarche perturbative présentée au sous-chapitre précédent.

Comme à l'équation (8.43), le Lagrangien pour l'onde évanescente stationnaire est décomposé en deux termes $L = L_0 - \epsilon V_1$. Le premier, L_0, est le Lagrangien non perturbé

$$L_0(x, z\,;\, v_x, v_z) = \frac{M}{2}\left(v_x^2 + v_z^2\right) - V_{\max}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}, \tag{8.67}$$

qui contient la partie non modulée du potentiel dipolaire (5.5), et le deuxième correspond au potentiel perturbateur

$$\epsilon V_1(x, z) = \epsilon V_{\max}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}\,\cos 2qx, \tag{8.68}$$

qui représente la partie modulée du potentiel.

Les trajectoires non perturbées

Rappelons que pour un contraste nul, l'action classique (8.36) est calculée le long d'une trajectoire classique $\mathbf{r}^{(0)}(t)$ qui aboutit à l'instant t_f à la position $\mathbf{r}_f = (x_f, z_f)$ en dehors du réseau de diffraction et qui commence à l'instant t_i avec une vitesse égale à la vitesse incidente $\mathbf{v}_i = (v_{xi}, -v_{zi})$ dans la région asymptotique.

Pour le Lagrangien non perturbé L_0 (8.67), nous constatons qu'il y a deux trajectoires possibles qui sont représentées sur la figure 8.6 : la première, $\mathbf{r}^{(0)}_{\text{inc}}(t)$, correspond à un atome qui n'a pas encore interagi avec le réseau, et seulement la deuxième, $\mathbf{r}^{(0)}_{\text{réf}}(t)$, à un atome réfléchi. Nous notons que ces deux trajectoires correspondent à l'onde atomique incidente et l'onde réfléchie spéculairement, et la fonction d'onde totale en est la superposition.

Les trajectoires $\mathbf{r}^{(0)}_{\text{inc}}(t)$ et $\mathbf{r}^{(0)}_{\text{réf}}(t)$ sont toutes les deux de la forme (6.5) donnée au chapitre 6, à un changement de l'origine du temps près : leurs composantes verticales valent

$$z^{(0)}_{\text{inc,réf}}(t) = z_{\text{reb}}(v_{zi}) + \kappa^{-1}\ln\cosh\left(t - t_{\text{inc,réf}}\right)/\tau_{\text{int}}, \tag{8.69}$$

où $z_{\text{reb}}(v_{zi})$, le point de rebroussement dans le potentiel non modulé, est défini à l'équation (6.6), et $\tau_{\text{int}} = 1/\kappa v_{zi}$ est le temps d'interaction. Les instants $t_{\text{inc,réf}}$ où l'atome rebrousse chemin, sont fixés à partir de la condition

$$z^{(0)}_{\text{inc,réf}}(t_f) = z_f. \tag{8.70}$$

En développant la trajectoire (8.69) dans la région asymptotique, on trouve ainsi

$$t_{\text{inc,réf}} = t_f \pm \frac{z_f - \zeta^{(\text{cl})}_{\text{eff}}}{v_{zi}} \tag{8.71}$$

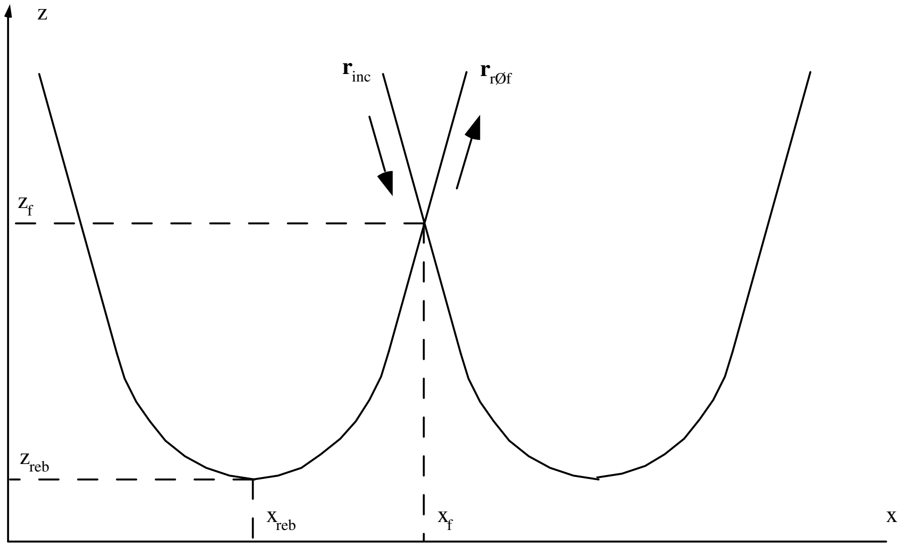

Figure 8.6: Deux trajectoires classiques, $\mathbf{r}_{\text{inc}}$ *et* $\mathbf{r}_{\text{réf}}$ *qui aboutissent à la position* (x_f, z_f).

où il faut prendre le signe supérieur (inférieur) pour t_{inc} ($t_{\text{réf}}$), respectivement, et où $\zeta_{\text{eff}}^{(\text{cl})} = z_{\text{reb}} - \kappa^{-1} \ln 2$ est la position du miroir effectif classique défini à (**Pha** 5). Pour la trajectoire incidente, t_{inc} correspond à l'instant où $\mathbf{r}_{\text{inc}}^{(0)}(t)$ va atteindre le point de rebroussement z_{reb} dans l'onde évanescente ; pour la trajectoire réfléchie, $t_{\text{réf}}$ donne l'instant où $\mathbf{r}_{\text{réf}}^{(0)}(t)$ se trouvait à la position z_{reb}. Les deux trajectoires incidente et réfléchie ont la même composante horizontale $x^{(0)}(t)$ donnée par

$$x^{(0)}(t) = x_f + v_{xi}\,(t - t_f)\,. \tag{8.72}$$

Comme les directions Ox et Oz sont découplées pour le mouvement de l'atome le long de la trajectoire non perturbée, l'action est dans ce cas une somme de deux termes. Pour la direction horizontale, elle correspond à un mouvement libre ; pour la direction verticale, nous pouvons nous servir des résultats du paragraphe **Pha** 2.3 à l'annexe 3.A sur la réflexion simple. Pour la trajectoire incidente, on trouve alors

$$S_{\text{inc}}^{(0)}(\mathbf{r}_f|\mathbf{v}_i) = Mv_{xi}x_f - Mv_{zi}z_f, \tag{8.73}$$

où nous avons omis le terme $-E_i(t_f - t_i)$ dépendant du temps. Pour la trajectoire réfléchie, nous avons

$$S_{\text{réf}}^{(0)}(\mathbf{r}_f|\mathbf{v}_i) = Mv_{xi}x_f + Mv_{zi}z_f + \hbar\left[\Delta\varphi_{\text{BKW}}(v_{zi}) + \pi\right], \tag{8.74}$$

où $\Delta\varphi_{\text{BKW}}(v_{zi})$ est le déphasage à la réflexion (**Pha** 9) dans l'approximation BKW.[16]

[16]La phase π dans (8.74) a son origine dans notre définition du déphasage $\Delta\varphi$ qui utilise le

L'action au premier ordre : le déphasage

Pour obtenir l'effet de la perturbation $\epsilon V_1(x,z)$ à l'ordre le plus bas en ϵ, nous calculons l'action au premier ordre $S^{(1)}$. D'après l'expression (8.45), nous devons intégrer la perturbation $\epsilon V_1(x,z)$ le long des trajectoires non perturbées $\mathbf{r}^{(0)}(t)$. Comme la trajectoire incidente n'interagit pas avec le potentiel pour $t < t_f$, sa contribution $S^{(1)}_{\text{inc}}$ s'annule.

Pour la trajectoire réfléchie, l'action $S^{(1)}_{\text{réf}}$ prend la forme suivante[17]

$$S^{(1)}_{\text{réf}}(\mathbf{r}_f|\mathbf{v}_i) = -\epsilon\frac{Mv_{zi}^2}{2}\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t\,\frac{\cos 2q[x_f + v_{xi}(t-t_f)]}{\cosh^2(t-t_{\text{réf}})/\tau_{\text{int}}}. \tag{8.75}$$

L'intégrale à calculer dans (8.75) est de la même forme que celle pour le transfert de vitesse classique (6.8). Le calcul présenté à l'annexe 6.A donne alors le résultat suivant

$$S^{(1)}_{\text{réf}}(\mathbf{r}_f|\mathbf{v}_i) = -\epsilon\frac{Mv_{zi}}{\kappa}\,\beta(2q\tan\theta_i/\kappa)\cos 2qx_{\text{reb}}, \tag{8.76}$$

où $\beta(2q\tan\theta_i/\kappa)$ est le facteur d'obliquité défini à l'équation (6.12) et θ_i l'angle d'incidence dans le plan xOz du réseau. La position de rebroussement x_{reb} est égale à la position de la trajectoire réfléchie à l'instant de rebroussement $t_{\text{réf}}$:

$$x_{\text{reb}} = x_f + v_{xi}(t_{\text{réf}} - t_f) = x_f - (z_f - \zeta^{(\text{cl})}_{\text{eff}})\tan\theta_i, \tag{8.77}$$

et c'est à travers x_{reb} que l'action $S^{(1)}_{\text{réf}}$ dépend de la position finale[18] (x_f, z_f). Elle ne dépend d'ailleurs pas des instants t_i et t_f dans la mesure où l'atome se trouve alors dans la région asymptotique où le potentiel s'annule [voir l'intégrale (8.75)].

L'onde atomique réfléchie présente donc un déphasage avec une modulation sinusoïdale

$$\Delta\varphi(x_f, z_f) = -u_{\text{mod}}\cos 2qx_{\text{reb}}, \tag{8.78}$$

développement asymptotique (7.23) de la fonction d'onde non perturbée

$$z \to +\infty : \quad \psi^{(0)}(x,z) \propto \sin\left(k_{zi}z + \tfrac{1}{2}\Delta\varphi\right)\exp \mathrm{i}k_{xi}x.$$

La référence de phase pour $\Delta\varphi$ est donc la réflexion sur une barrière de potentiel infinie à $z = 0$. Le changement de signe de l'onde à la réflexion correspond au déphasage π que nous avons ajouté dans (8.74).

[17]Pour la diffraction en transmission par le potentiel dipolaire (8.7) de l'effet KAPITZA–DIRAC, nous trouvons une expression de la même forme que (8.75) si le profil du réseau est donné par

$$f(z) = \epsilon\frac{Mv_{zi}^2}{2V_1}\frac{1}{\cosh^2\kappa z}$$

qui est proportionnel à l'énergie cinétique incidente $\frac{1}{2}Mv_{zi}^2$ et présente une épaisseur $w \sim \kappa^{-1}$.

[18]Notons que le résultat (8.76) pour l'action au premier ordre $S^{(1)}(x_f, z_f)$ permet d'obtenir les transferts de vitesse classiques (6.11, 6.21) en prenant sa dérivée par rapport à x_f et z_f, respectivement.

dont l'amplitude de modulation $u_{\rm mod}$ vaut

$$u_{\rm mod} = \epsilon \frac{M v_{zi}}{\hbar\kappa} \beta(2q \tan\theta_i/\kappa) \,. \tag{8.79}$$

Nous constatons d'abord que l'indice de modulation $u_{\rm mod}$ augmente avec la vitesse incidente, $u_{\rm mod} \propto v_{zi}$, alors qu'en transmission (l'effet KAPITZA–DIRAC), il lui était inversement proportionnel, $u_{\rm mod} \propto 1/v_{zi}$ [voir (8.18)]. Ceci est dû au fait que l'indice de modulation est proportionnel au produit de la valeur maximale du potentiel perturbateur et du temps d'interaction. Pour l'effet KAPITZA-DIRAC, la hauteur du potentiel est fixée, et $u_{\rm mod}$ diminue avec la vitesse parce que le temps d'interaction $\tau_{\rm int} = w/v_{zi}$ diminue. Pour l'onde évanescente stationnaire par contre, la valeur maximale du potentiel perturbateur (atteinte au point de rebroussement) est fixée par l'énergie incidente et vaut $\epsilon M v_{zi}^2/2$. Son augmentation avec la vitesse incidente l'emporte donc sur la diminution du temps d'interaction $\tau_{\rm int} = 1/\kappa v_{zi}$.

Ensuite, l'indice de modulation (8.79) décroît lorsqu'on s'éloigne de l'incidence normale à cause du facteur d'obliquité $\beta(\xi)$. Nous notons que nous avons trouvé le même argument $\xi = 2q\tan\theta_i/\kappa$ au transfert de vitesse classique (8.64). Rappelons que le facteur d'obliquité apparaît également sous cette forme dans l'approximation de BORN au régime de RAMAN–NATH [voir (7.56)]. En effet, nous verrons que l'approximation du réseau de phase mince n'est valable que dans ce régime.

Estimation de l'erreur de phase à l'ordre deux

Pour estimer l'erreur sur l'action que l'on fait dans l'approximation du réseau de phase mince, nous allons nous servir de l'estimation (8.52) pour l'action à l'ordre deux. Rappelons que l'approximation est valable à condition cette action $S^{(2)}$ est petite devant $\hbar$.

Plus précisément, nous utilisons dans la condition (8.52) le temps d'interaction $\tau_{\rm int} = 1/\kappa v_{zi}$, la relation (8.56) entre le transfert de vitesse maximal et la largeur $n_{\rm max} \simeq u_{\rm mod}$ de la figure de diffraction, ainsi que la conservation d'énergie au premier ordre en ϵ (8.57). Nous trouvons alors la condition suivante :

$$\frac{|S^{(2)}|}{\hbar} \lesssim n_{\rm max}^2 \frac{2q^2}{\kappa k_{zi}\cos^2\theta_i} \simeq u_{\rm mod}^2 \frac{2q^2}{\kappa k_{zi}\cos^2\theta_i} \ll 1. \tag{8.80}$$

Dans cette expression apparaît le paramètre $2q^2/\kappa k_{zi}\cos^2\theta_i$ que nous avons identifié au paragraphe (7.3.3) pour caractériser le régime de RAMAN–NATH [la condition (7.58)]. Dans le présent contexte, c'est ce paramètre qui fixe une limite supérieure à l'indice de modulation $u_{\rm mod}$. En particulier, nous constatons que pour décrire le régime d'une modulation de phase forte, $u_{\rm mod} > 1$, avec l'approximation du réseau de phase mince, il est nécessaire de se placer dans le régime de RAMAN–NATH ; car la condition (8.80) implique alors

$$1 < u_{\rm mod} \ll \sqrt{\frac{\kappa k_{zi}\cos^2\theta_i}{2q^2}}, \tag{8.81}$$

ce qui est équivalent au critère (7.58) pour le régime de RAMAN–NATH. D'autre part, nous verrons au paragraphe (8.4.5) que dans le régime d'une modulation de phase faible, $u_{\mathrm{mod}} \ll 1$, le régime de RAMAN–NATH est également nécessaire pour que l'approximation du réseau de phase mince reproduise les résultats de l'approximation de BORN.

Notons pour finir que si l'on fixe un indice de modulation de quelques unités, la condition (8.80) est généralement vérifiée dans les réalisations expérimentales de la diffraction d'atomes par l'onde évanescente stationnaire lorsque l'on se place au voisinage de l'incidence normale. La raison en est que l'on se trouve largement dans le régime de RAMAN–NATH parce que le vecteur d'onde incident est beaucoup plus grand que la vitesse de recul $\hbar q/M$ et que les vecteurs d'onde q et κ de l'onde évanescente sont comparables.

Remarque. La présente condition de validité permet également de vérifier que l'approche BKW généralisée est valable dans un domaine de paramètres plus large que l'approximation du réseau de phase mince. En utilisant l'indice de modulation u_{mod} donné par l'expression (8.79), l'on tire de (8.80) :

$$\epsilon \left(\frac{q}{\kappa}\right)^2 \beta \ll \sqrt{\frac{2q^2 \cos^2\theta_i}{\kappa k_{zi}}}, \tag{8.82}$$

et en comparant à la condition (8.66) pour l'approche semi-classique (que les trajectoires classiques ne se croisent pas dans la zone d'interaction), nous constatons que (8.82) est généralement beaucoup plus restrictif. Pour le cas de l'incidence rasante, où (8.82) est certes satisfaite, la comparaison avec l'approximation de BORN montrera que l'approche du réseau de phase mince n'est pas valable parce que la conservation d'énergie au premier ordre est insuffisante pour déterminer les vecteurs d'onde diffractés.

8.4.3 Les amplitudes de diffraction

Les amplitudes de diffraction sont maintenant données par l'intégrale de FOURIER (8.61). Rappelons qu'y interviennent les phases associées aux actions $S^{(0)}$ à l'ordre zéro (8.74) et $S^{(1)}$ au premier ordre (8.76). Nous considérons d'abord la contribution de la trajectoire réfléchie :

$$\begin{aligned} a_n^{(\text{réf})} &= -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Delta\varphi_{\mathrm{BKW}}} \times \\ &\times \int_0^a \frac{\mathrm{d}x_f}{a} \exp\mathrm{i}\left[-u_{\mathrm{mod}} \cos 2q(x_f - (z_f - \zeta_{\mathrm{eff}}^{(\mathrm{cl})})\tan\theta_i) - 2nqx_f - (k_{zn} - k_{zi})z_f\right]. \end{aligned} \tag{8.83}$$

Le calcul de cette intégrale donne

$$\begin{aligned} a_n^{(\mathrm{r.m.})} &= -(-\mathrm{i})^n J_n(u_{\mathrm{mod}}) \exp\mathrm{i}\left[\Delta\varphi_{\mathrm{BKW}} + 2nq\zeta_{\mathrm{eff}}^{(\mathrm{cl})} \tan\theta_i + \right. \\ &\qquad \left. + (k_{zi} - 2nq\tan\theta_i - k_{zn})z_f\right], \end{aligned} \tag{8.84}$$

où l'argument $u_{\rm mod}$ des fonctions de BESSEL est égal à l'indice de modulation de phase donné à l'équation (8.79). Les populations (8.62) des ordres de diffraction sont alors données par

$$w_n^{(\rm r.m.)} = J_n^2(u_{\rm mod}). \tag{8.85}$$

Remarque. Comme l'onde incidente se propage vers le réseau, nous nous attendons à ce qu'elle ne contribue pas à la figure de diffraction. Pour le vérifier, nous devons revenir à l'intégrale (8.40) qui contient le facteur d'obliquité du principe de HUYGHENS–FRESNEL. En rappelant que la vitesse finale de la trajectoire incidente $\mathbf{r}_{\rm inc}^{(0)}(t)$ vaut $v_{zf} = -v_{zi}$ et que l'action $S_{\rm inc}^{(1)}$ s'annule, nous trouvons alors :

$$a_n^{(\rm inc)} = \int_0^a \frac{{\rm d}x_f}{2a}\left(1 - \frac{k_{zi}}{k_{zn}}\right)\exp[-2{\rm i}nqx_f - {\rm i}(k_{zn} - k_{zi})z_f]\,. \tag{8.86}$$

L'intégrale sur x_f étant proportionnelle à $\delta_{n,0}$, c'est le facteur d'obliquité de HUYGHENS–FRESNEL, en parenthèses au deuxième membre de (8.86), qui fait que les amplitudes $a_n^{(\rm inc)}$ s'annulent toutes.

8.4.4 Allure de la figure de diffraction

Nous étudions ici la dépendance de la figure de diffraction (8.85) en fonction de l'indice de modulation de phase $u_{\rm mod}$.

Notons d'abord que comme pour l'effet KAPITZA–DIRAC dans l'approximation de RAMAN–NATH, les populations (8.85) font intervenir les carrés des fonctions de BESSEL. Ceci n'est pas surprenant puisque dans les deux cas, la phase atomique présente une modulation sinusoïdale après l'interaction avec le réseau de diffraction. Sur la figure 8.7, nous montrons les carrés des premiers fonctions de BESSEL J_n en fonction de l'indice de modulation $u_{\rm mod}$. A cause de la relation

$$J_{-n}(u_{\rm mod}) = (-1)^n J_n(u_{\rm mod}), \qquad n = 0, 1, \ldots \tag{8.87}$$

la figure de diffraction (8.85) est symétrique.

Pour un indice de modulation faible devant l'unité, la population de l'ordre spéculaire est proche de l'unité et parmi les populations non spéculaires, seules celles des ordres $n = \pm 1$ sont notablement différentes de zéro (voir la figure 8.8). Puisque l'approximation de BORN est valable dans ce régime, nous pouvons la comparer au résultat (8.85) et établir ainsi un critère de validité pour l'approche du réseau de phase mince dans la limite perturbative (voir au paragraphe 8.4.5 suivant).

Lorsque l'indice modulation devient de l'ordre de l'unité, la population de l'ordre spéculaire diminue. Elle s'annule en particulier aux racines de la fonction de BESSEL J_0 dont les premières sont données par[19]

$$J_0(u_{\rm mod}) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad u_{\rm mod} = 2.40483,\, 5.52008,\, 8.65373, \ldots \tag{8.88}$$

[19] ABRAMOWITZ et STEGUN, *op. cit.*, tableau 9.5.

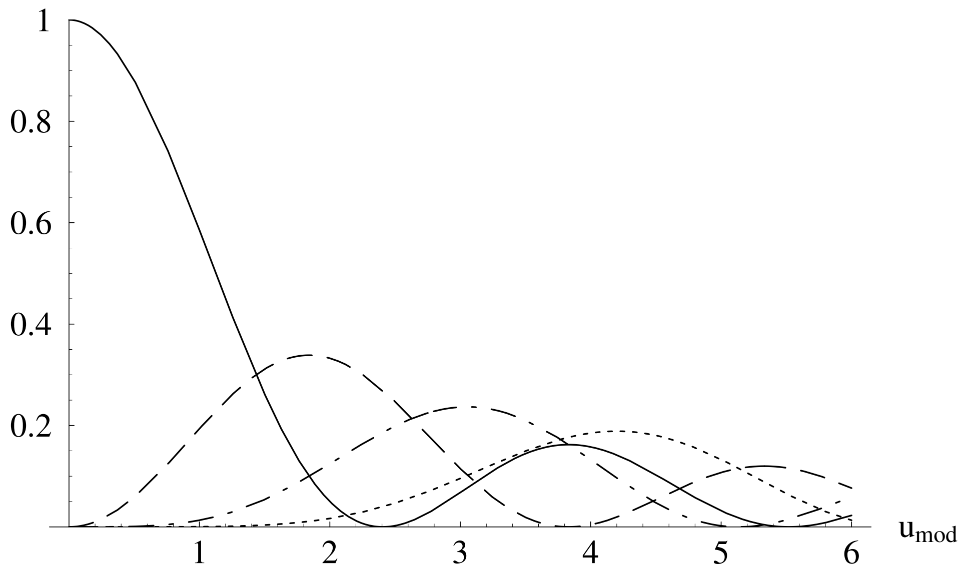

Figure 8.7: Carrés des fonctions de BESSEL $J_n^2(u_{\text{mod}})$ *pour* $n = 0, 1, 2, 3$*, en fonction de l'indice de modulation* u_{mod}*. Traits pleins :* $n = 0$*, tirets :* $n = 1$*, point-tirets :* $n = 2$*, pointillées :* $n = 3$*.*

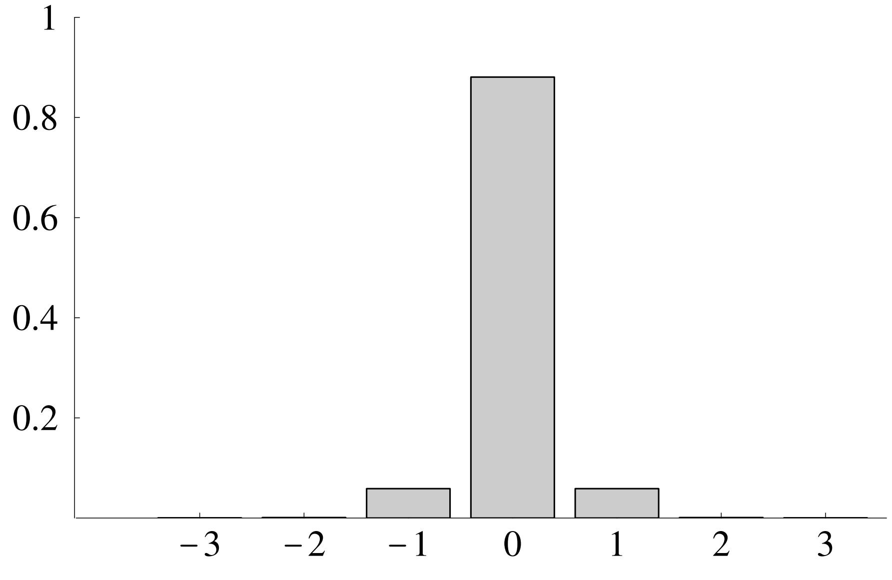

Figure 8.8: Figure de diffraction pour un indice de modulation faible ($u_{\text{mod}} = 0.1$*).*

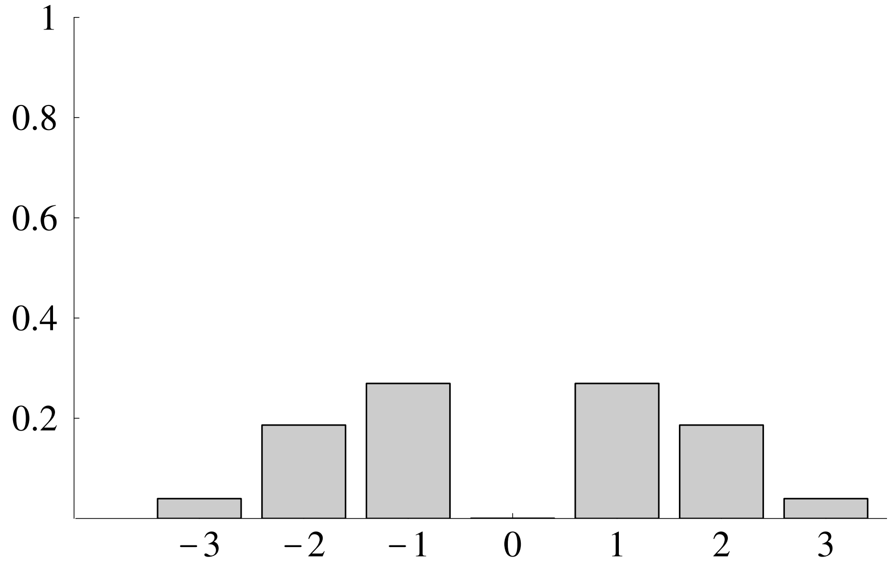

Figure 8.9: Figure de diffraction pour un indice de modulation $u_{\mathrm{mod}} = 2.405$ *où* $J_0(u_{\mathrm{mod}}) = 0$.

La figure de diffraction correspondant à la première racine $u_{\mathrm{mod}} \approx 2.405$ est représentée sur la figure 8.9.

Finalement, pour un indice de modulation grand devant l'unité, un grand nombre d'ordres apparaissent dans la figure de diffraction. Un exemple est présenté sur la figure 8.10. Nous constatons que les populations les plus grandes sont celles des ordres $n \simeq \pm u_{\mathrm{mod}}$ et qu'entre ces maximums, les populations ont un comportement oscillatoire en fonction de l'ordre n. La figure montre aussi la distribution de vitesse finale donnée par l'approche perturbative du chapitre 6, et nous voyons qu'elle est une bonne approximation pour l'allure générale de la figure de diffraction. Nous comparerons les deux distributions en plus grand détail au paragraphe 8.4.6.

8.4.5 Modulation de phase faible : comparaison à l'approximation de BORN

Sur la figure 8.11, nous comparons, en incidence normale, les populations (8.85) des ordres $n = 0, 1, 2$ au résultat (7.40) de l'approximation de BORN pour $n = 1$, en fonction du contraste ϵ du réseau. Nous constatons que les deux approximations sont en accord pour des contrastes faibles, tant que les populations des premiers ordres sont petites devant l'unité. Pour un contraste au-delà de la limite perturbative, $\epsilon\beta \gtrsim \kappa/k_{zi}$, les populations des ordres $n = \pm 1$ restent en deçà de l'estimation de BORN parce que les ordres ± 2 commencent à être peuplés eux aussi.

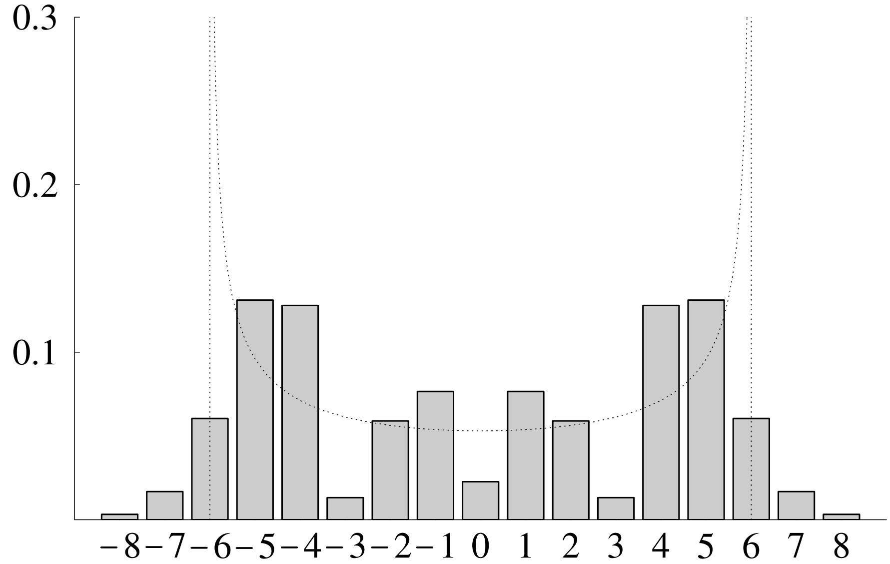

Figure 8.10: Figure de diffraction dans le régime de modulation de phase forte ($u_{\rm mod} = 6$). En pointillées : distribution de vitesse classique avec une largeur $\Delta v_x^{\rm max} = u_{\rm mod}(2\hbar q/M)$.

Comparaison des populations

Nous étudions maintenant les conditions qui permettent de retrouver les populations données par l'approximation de BORN par la méthode du réseau de phase mince. Rappelons que pour un indice de modulation petit devant l'unité, les fonctions de BESSEL ont le comportement suivant

$$u_{\rm mod} \ll 1 \ : \qquad J_n(u_{\rm mod}) = \frac{1}{n!}\left(\frac{u_{\rm mod}}{2}\right)^n + \mathcal{O}\Big[(u_{\rm mod})^{n+2}\Big] \tag{8.89}$$

[pour $n \geq 0$, le cas $n < 0$ est couvert par la relation (8.87)]. A l'ordre le plus bas en $u_{\rm mod}$, les populations (8.85) des ordres $n = \pm 1$ deviennent donc

$$w_{\pm 1}^{(\rm r.m.)} = \frac{\epsilon^2}{4}\left(\frac{k_{zi}}{\kappa}\right)^2 \beta^2\!\left(\frac{2q\tan\theta_i}{\kappa}\right). \tag{8.90}$$

D'autre part, nous avons obtenu le résultat (7.40) à l'aide de l'approximation de BORN dans la limite semi-classique :

$$w_{\pm 1}^{(\rm Born)} = \frac{\epsilon^2}{4}\left(\frac{k_{zi}}{\kappa}\right)^2\left(1 + \frac{\Delta k_{z,\pm 1}}{2k_{zi}}\right)^2 \beta^2\!\left(\frac{\Delta k_{z,\pm 1}}{\kappa}\right). \tag{8.91}$$

Nous constatons que, mis à part l'argument du facteur d'obliquité β, les populations (8.90) et (8.91) diffèrent au premier ordre par rapport à $\Delta k_{z,\pm 1}/k_{zi}$. Cette différence

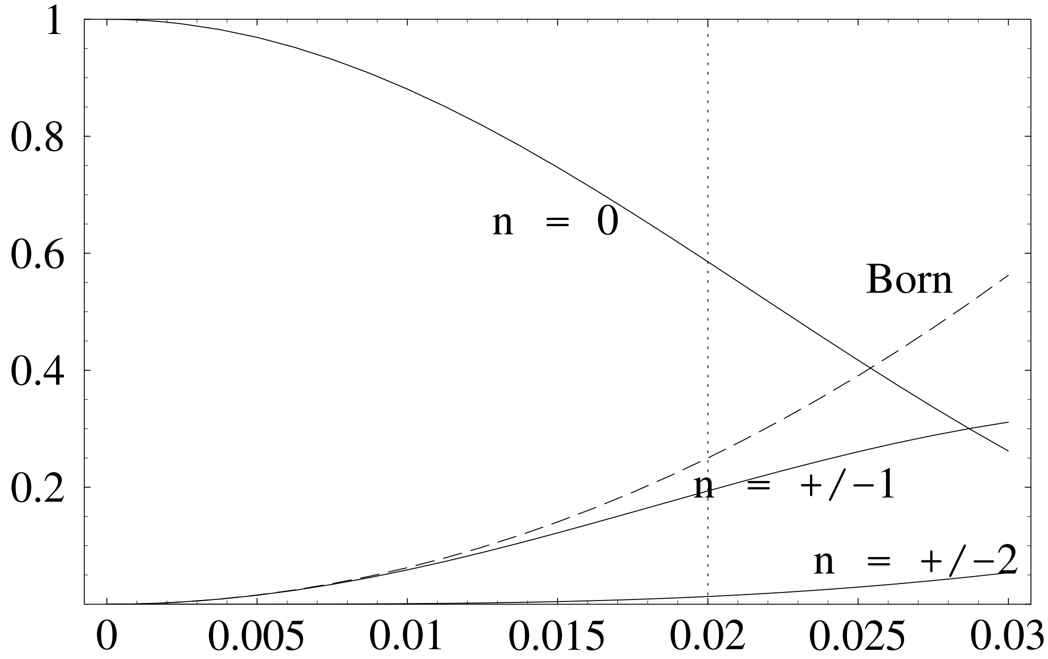

Figure 8.11: Populations des ordres de diffraction $n = 0, 1, 2$ *en fonction du contraste* ϵ *du réseau.*
Trait plein : approximation du réseau de phase mince (8.85). Tirets : approximation de BORN *dans la limite semi-classique (7.40). La ligne en pointillées marque la limite de validité de l'approximation de* BORN $u_{\text{mod}} = \epsilon\beta k_{zi}/\kappa = 1$.
Les atomes sont incidents en incidence normale avec $k_{zi} = 50\,\kappa$, *et* $q = \kappa$.

est une petite correction tant que le transfert de vecteur d'onde est faible devant le vecteur d'onde incident :

$$\left|\frac{\Delta k_{z,\pm 1}}{k_{zi}}\right| \ll 1. \tag{8.92}$$

D'autre part, les arguments du facteur d'obliquité β dans (8.91) et (8.90) font intervenir le transfert de vecteur d'onde $\Delta k_{z,\pm 1}$ et son approximation linéaire

$$\Delta k_{z,\pm 1} \approx \mp 2q \tan\theta_i, \tag{8.93}$$

que nous avons introduite dans le régime de RAMAN–NATH au paragraphe 7.3.3 [l'équation (7.54)]. Nous avons vu que cette approximation revient à remplacer, dans le diagramme d'EWALD, le cercle de la conservation d'énergie par sa tangente au vecteur d'onde spéculaire (voir la figure 7.13). Rappelons qu'elle est justifiée pour calculer la valeur du facteur d'obliquité, si la condition (7.58) pour le régime de RAMAN–NATH est satisfaite :

$$\frac{2q^2}{\kappa k_{zi}} \frac{1}{\cos^2\theta_i} \ll 1. \tag{8.94}$$

En utilisant l'approximation linéaire (8.93) pour les transferts de vecteur d'onde $\Delta k_{z,\pm 1}$, on montre que la condition précédente (8.92) est contenue dans le régime de RAMAN–NATH (8.94) :

$$\left|\frac{\Delta k_{z,\pm 1}}{k_{zi}}\right| \approx \frac{2q\tan\theta_i}{k_{zi}} \leq \frac{2q}{k_{zi}\cos\theta_i} \overset{(8.94)}{\ll} \sqrt{\frac{2\kappa}{k_{zi}}} \ll 1 \tag{8.95}$$

où la dernière inégalité est une conséquence du régime semi-classique. C'est donc la condition (8.94) du régime de RAMAN–NATH qui caractérise la validité de l'approximation du réseau de phase mince dans la limite d'une modulation de phase faible. Notons que nous l'obtenons également en prenant le cas particulier $u_{\text{mod}} \simeq n_{\text{max}} = 1$ dans le critère de validité (8.80) que nous avons trouvé pour une modulation de phase forte.

Pour illustrer la mise en défaut de l'approximation du réseau de phase mince, nous comparons aux figures 8.12 et 8.13 les expressions (8.90) et (8.91) pour les populations $w_{\pm 1}$ en fonction de l'angle d'incidence.

La figure 8.12 correspond au régime de BRAGG que nous avons introduit au paragraphe 7.3.3 et qui est complémentaire à la condition (8.94). Nous voyons que l'approximation du réseau de phase mince ne peut rendre compte des résonances de BRAGG. La raison en est l'approximation linéaire (8.93) pour les transferts de vecteur d'onde, qui néglige le fait que les $\Delta k_{z,\pm 1}$ s'annulent non pas en incidence normale, mais aux angles de résonance $\pm\theta_B$.

Sur la figure 8.13, nous constatons que la décroissance des populations lorsque l'angle d'incidence augmente n'est pas correctement décrite par l'approximation du réseau de phase mince : celle-ci donne certes des populations qui décroissent, mais ne rend pas compte de l'asymétrie de la figure de diffraction. Ceci est la conséquence

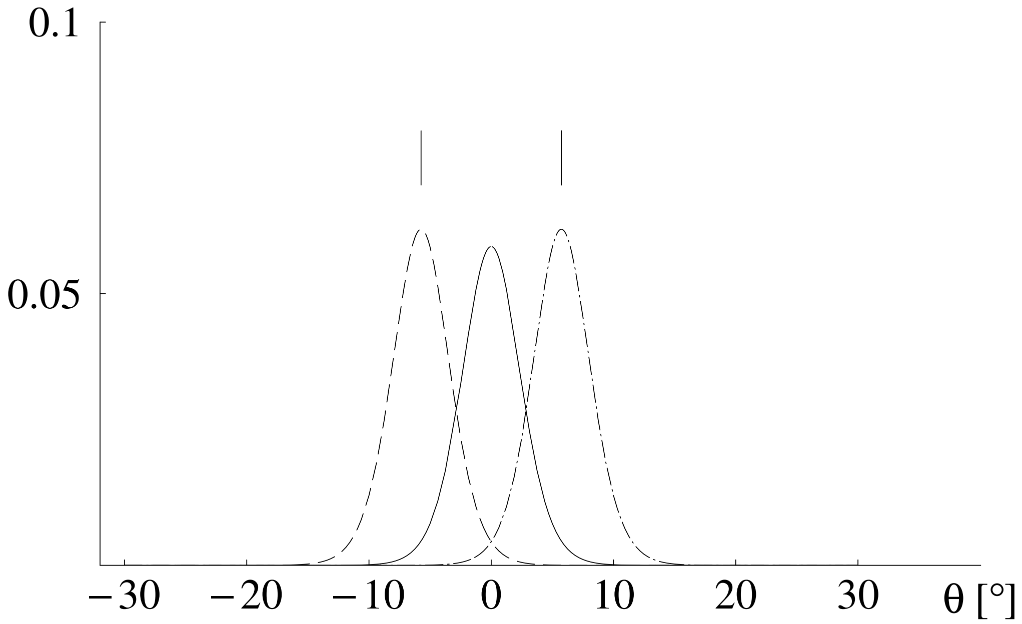

Figure 8.12: Populations $w_{\pm 1}$ *en fonction de l'angle d'incidence, dans le régime de* BRAGG. *Les traits verticaux marquent les angles de résonance* $\theta_B \approx \pm 5.°7$.
Tirets (point-tirets) : populations (8.91) dans l'approximation de BORN *pour les ordres* $n = +1$ *(*$n = -1$*). Trait plein : résultat (8.90) de l'approximation du réseau de phase mince ; ces populations sont identiques pour les ordres* $n = \pm 1$*, et leur maximum est inférieur aux populations maximales de l'approximation de* BORN*, à cause d'une population non nulle dans les ordres* $n = \pm 2$.
Paramètres : le module du vecteur d'onde incident vaut $k_i = 100\,\kappa$, $\kappa = 0.1\,q$, $\epsilon = 0.005$. *Le paramètre (8.94) pour le régime de* RAMAN–NATH *vaut* $2/\cos^2\theta_i$.

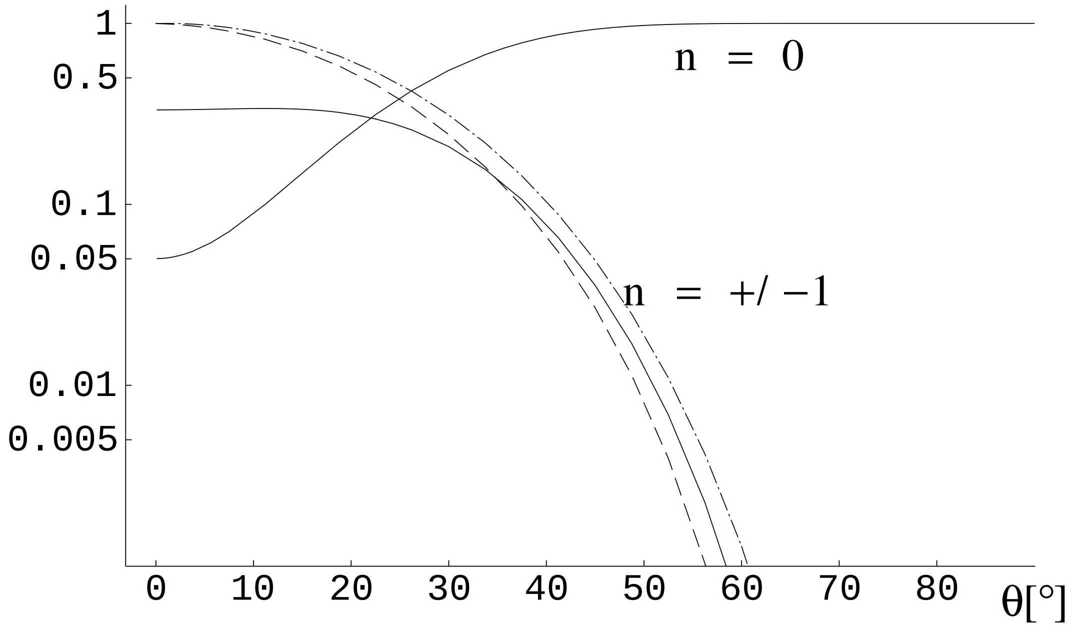

Figure 8.13: Populations $w_{\pm 1}$ en fonction de l'angle d'incidence, en échelle logarithmique.
Tirets (point-tirets) : populations (8.91) dans l'approximation de BORN *pour les ordres $n = +1$ ($n = -1$) ; trait plein : résultat (8.90) de l'approximation du réseau de phase mince pour les ordres $n = 0$ et $n = \pm 1$.*
Paramètres : le module du vecteur d'onde vaut $k_i = 50\,\kappa$, $\kappa = q$, $\epsilon = 0.04$. Le paramètre (8.94) pour le régime de RAMAN–NATH *vaut $0.04/\cos^2\theta_i$.*

du fait que le facteur d'obliquité $\beta(\Delta k_{z,\pm 1}/\kappa)$ varie alors de façon rapide en fonction des transferts de vecteur d'onde $\Delta k_{z,\pm 1}$ et que les expressions approchées pour $\Delta k_{z,\pm 1}$ conduisent à des écarts importants. Finalement, en incidence rasante, les transferts $\Delta k_{z,\pm 1}$ deviennent du même ordre que le vecteur d'onde incident k_{zi} de sorte que les deux conditions (8.92, 8.94) sont violées.

Comparaison des phases des amplitudes de diffraction

Après avoir étudié les populations des ordres, comparons maintenant les phases des amplitudes de diffraction pour les approximations du réseau de phase mince et de BORN dans la limite d'une modulation de phase faible.

Dans l'annexe 8.C, nous évaluons la différence de phase entre les résultats (7.33) et (8.84) pour les amplitudes de diffraction. Nous constatons que celle-ci a deux origines :

- l'approximation linéaire (8.93) pour les vecteurs d'onde diffractés, d'une part,

- et la linéarisation du déphasage à la réflexion, d'autre part :

$$\Delta\varphi_{\text{BKW}}(k_{z,\pm1}) \approx \Delta\varphi_{\text{BKW}}(k_{zi}) + \Delta k_{z,\pm1}\frac{\partial\Delta\varphi_{\text{BKW}}}{\partial k_{zi}}. \tag{8.96a}$$

En poussant ces développements limités jusqu'au deuxième ordre, nous obtenons dans l'annexe 8.C l'estimation suivante pour la phase $\delta\varphi_{\pm1}$ que néglige l'approximation du réseau de phase mince

$$\begin{aligned} \delta\varphi_{\pm1} &\equiv \varphi_{\pm1}^{(\text{Born})} - \varphi_{\pm1}^{(\text{r.m.})} \\ &\approx -\frac{2q^2}{k_{zi}\cos^2\theta_i}\left[z_f - \left(\zeta_{\text{eff}}^{(\text{cl})} + \kappa^{-1}\sin^2\theta_i\right)\right]. \end{aligned} \tag{8.97}$$

Cette phase est petite devant l'unité dans le régime de RAMAN–NATH (8.94) tant que la distance $z_f - \zeta_{\text{eff}}^{(\text{cl})}$ entre la position finale et le miroir effectif est de l'ordre de quelques longueurs de décroissance $1/\kappa$.

Comme pour l'approximation de RAMAN–NATH [voir à l'équation (8.31)], nous constatons donc de nouveau que le calcul de la phase le long des trajectoires non perturbées est valable seulement jusqu'à une distance finie z_f en aval du réseau de diffraction, et qu'il faut se servir d'une approche plus rigoureuse (le principe de HUYGHENS–FRESNEL) pour propager la fonction d'onde diffractée vers l'infini où les amplitudes de diffraction sont observées. En outre, c'est dans le régime de RAMAN–NATH qu'il est possible de trouver une position z_f finale qui permette à la fois de tenir compte du déphasage accumulé dans le réseau de diffraction, et d'éviter que le traitement approché de la conservation d'énergie inhérent à l'approximation (8.93), ne conduise à des erreurs de phase qui dépassent l'unité.

Conclusion pour le régime de modulation de phase faible

Pour une modulation de phase faible, l'approche du réseau de phase mince rejoint la limite semi-classique de l'approximation de BORN lorsqu'il est légitime d'approximer le cercle de la conservation d'énergie par sa tangente pour trouver les transferts de vecteur d'onde normaux $\Delta k_{z,\pm1}$. Cette approximation correspond au régime de RAMAN–NATH que nous avons identifié au paragraphe 7.3.3 et qui est caractérisé par la condition (8.94). Nous rappelons que ce régime est réalisé dans la limite semi-classique en incidence normale et oblique, si la période π/q et l'épaisseur $1/\kappa$ de l'onde évanescente stationnaire sont du même ordre de grandeur. L'approximation du réseau de phase mince réproduit alors les populations des ordres $n = \pm1$ de diffraction données par l'approximation de BORN. Par contre, elle s'écarte de l'approximation de BORN dans le régime de BRAGG (complémentaire au régime de RAMAN–NATH) et en incidence rasante parce qu'elle ne tient pas correctement compte de la conservation d'énergie pour déterminer les vecteurs d'ondes diffractés. Dans ces situations, seule l'approximation de BORN est valable.

L'approximation du réseau de phase mince permet également d'obtenir les phases des amplitudes de diffraction, en accord avec l'approximation de BORN, si l'on arrête le calcul semi-classique de la fonction d'onde à une distance du point de rebroussement qui est au plus de l'ordre de quelques longueurs de décroissance $1/\kappa$, et que l'on calcule à cette position les amplitudes de diffraction par l'analogue du principe de HUYGHENS–FRESNEL. Lorsque la position finale z_f tend vers l'infini, par contre, les expressions approchées pour les vecteurs d'onde diffractés entraînent des erreurs de phase pour les amplitudes a_n qui divergent proportionnellement à z_f.

8.4.6 Modulation de phase forte : comparaison à la distribution de vitesse classique

Nous montrons maintenant que dans la limite d'une modulation de phase forte, la distribution de vitesse classique donne l'enveloppe de la figure de diffraction.

La figure de diffraction (8.85) correspond à la distribution de vitesse suivante

$$\rho_{\text{qu}}(v_{xf}) = \sum_n |J_n(u_{\text{mod}})|^2 \delta(v_{xf} - v_{xi} - 2n\hbar q/M), \tag{8.98}$$

et à la limite d'une modulation de phase forte, les fonctions de BESSEL ont le comportement suivant[20]

$$u_{\text{mod}} \gg 1, \quad n < u_{\text{mod}} : \tag{8.99a}$$
$$J_n(u_{\text{mod}}) \approx \frac{\sqrt{2/\pi}}{\sqrt[4]{u_{\text{mod}}^2 - n^2}} \cos\Big(+ \sqrt{u_{\text{mod}}^2 - n^2} - \frac{\pi}{4} - n \arccos \frac{n}{u_{\text{mod}}} \Big),$$
$$u_{\text{mod}} \gg 1, \quad n > u_{\text{mod}} : \tag{8.99b}$$
$$J_n(u_{\text{mod}}) \approx \frac{1/\sqrt{2\pi}}{\sqrt[4]{n^2 - u_{\text{mod}}^2}} \exp\Big(+ \sqrt{n^2 - u_{\text{mod}}^2} - n\, \text{arcosh} \frac{n}{u_{\text{mod}}} \Big).$$

Ces expressions montrent que les plus grandes populations de la figure de diffraction correspondent aux ordres $n \simeq \pm u_{\text{mod}}$ (voir aussi la figure 8.10). Nous constatons que pour ces ordres, la diffraction conduit à un transfert de vitesse qui est égal au transfert de vitesse classique maximal (8.64)

$$u_{\text{mod}} \frac{2\hbar q}{M} = 2\epsilon \frac{q}{\kappa} \frac{\hbar k_{zi}}{M} \beta = \Delta v_x^{\max}. \tag{8.100}$$

Les maximums des populations coïncident donc avec les pics de la distribution de vitesse classique. On peut aller encore plus loin et montrer que la distribution ondulatoire $\rho_{\text{qu}}(v_{xf})$ rejoint la distribution de vitesse classique $\rho_{\text{cl}}(v_{xf})$ (6.26)

$$\rho_{\text{cl}}(v_{xf}) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{(\Delta v_x^{\max})^2 - (v_{xf} - v_{xi})^2}} \tag{8.101}$$

[20] ABRAMOWITZ et STEGUN, *op. cit.*, formules 9.3.2, 9.3.3.

pour $|v_{xf} - v_{xi}| < \Delta v_x^{\max}$. A cet effet, l'on moyenne sur les pics de diffraction dans (8.98) et sur les oscillations du $\cos^2$ dans les carrés des fonctions de BESSEL[21] (8.99a). Ceci est illustré sur la figure 8.10 où la courbe en pointillées représente la distribution de vitesse classique (8.101).

Remarque. La valeur quadratique moyenne du transfert de vitesse pour la figure de diffraction vaut, en utilisant une règle de somme pour les fonctions de BESSEL[22]

$$\begin{aligned}\left\langle \Delta v_x^2 \right\rangle_{\text{qu}} &= \left(\frac{2\hbar q}{M}\right)^2 \sum_n n^2\, J_n^2(u_{\text{mod}}) \\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{2\hbar q}{M}\right)^2 u_{\text{mod}}^2 = \frac{1}{2}\left(\Delta v_x^{\max}\right)^2 , \end{aligned} \tag{8.102}$$

et l'on constate que même pour une modulation de phase forte, elle coïncide encore avec la valeur quadratique moyenne du transfert de vitesse classique [voir (7.71) au paragraphe 7.3.4].

8.4.7 Comparaison à l'approximation BKW

Dans ce paragraphe, nous comparons pour l'exemple de la diffraction par l'onde évanescente stationnaire, l'approximation du réseau de phase mince à un calcul numérique de la fonction d'onde dans le régime semi-classique, dans l'esprit de l'optique géométrique. Nous utilisons l'approximation BKW généralisée que nous avons introduite au paragraphe 8.3.1, et présentons d'abord le principe du calcul.

La méthode numérique

Rappelons que la généralisation de l'approximation BKW permet d'obtenir, dans la limite semi-classique, la fonction d'onde atomique en termes de quantités classiques, quel que soit le nombre de dimensions du problème. Pour la diffraction d'atomes par le potentiel dipolaire $V(\mathbf{r})$ de l'onde évanescente stationnaire, nous avons alors à calculer l'action (8.36)

$$S(\mathbf{r}_f, t_f|\mathbf{v}_i, t_i) = M\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{r}(t_i) + \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \left(\frac{M}{2}\mathbf{v}^2(t) - V[\mathbf{r}(t)]\right), \tag{8.103}$$

où $\mathbf{r}(t)$ est une trajectoire classique dans le potentiel dipolaire complet $V(\mathbf{r})$. A l'instant t_i, la trajectoire $\mathbf{r}(t)$ a une vitesse égale à $\mathbf{v}_i$, et elle aboutit à la position $\mathbf{r}_f$ à l'instant t_f. En utilisant la conservation d'énergie,

$$\frac{M}{2}\mathbf{v}^2(t) + V[\mathbf{r}(t)] \equiv E_i, \tag{8.104}$$

[21] Les oscillations des populations w_n en fonction de n (pour $|n| \leq u_{\text{mod}}$) proviennent d'un effet d'interférence entre deux trajectoires classiques qui conduisent à la même vitesse finale (6.24) en fonction de la position de rebroussement x_{reb} [115].

[22] Cette règle de somme peut être démontrée à partir de la formule 9.1.41 dans ABRAMOWITZ et STEGUN, *op. cit.*

l'intégrale sur le potentiel peut s'exprimer en fonction de l'énergie, ce qui permet de séparer la dépendance explicite du temps, avec le résultat

$$S(\mathbf{r}_f, t_f|\mathbf{v}_i, t_i) = M\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{r}(t_i) - E_i(t_f - t_i) + \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t\, M\mathbf{v}^2(t). \tag{8.105}$$

En intégrant le dernier terme par parties, nous obtenons, compte tenu les équations du mouvement ainsi que des conditions aux bords pour la trajectoire $\mathbf{r}(t)$,

$$S(\mathbf{r}_f, t_f|\mathbf{v}_i, t_i) = M\mathbf{v}(t_f) \cdot \mathbf{r}_f - E_i(t_f - t_i) + \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t\, \mathbf{r}(t) \cdot \nabla V[\mathbf{r}(t)] - \pi\hbar/2, \tag{8.106}$$

où nous avons ajouté le retard de phase venant de la caustique autour du point de rebroussement (le dernier terme). L'expression (8.106) présente l'avantage que l'intégrale

$$\Delta S = \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t\, \mathbf{r}(t) \cdot \nabla V[\mathbf{r}(t)] \tag{8.107}$$

a un intégrand qui est localisé dans la zone d'interaction de sorte que nous pouvons limiter l'intégration à un intervalle de temps de l'ordre de quelques fois le temps d'interaction.

Pour ce qui est des unités du calcul, il est commode de se servir des mêmes échelles naturelles que pour le calcul des trajectoires du chapitre 6 (la longueur de décroissance $1/\kappa$ et le temps d'interaction $\tau_{\text{int}} = 1/\kappa v_{zi}$). On trouve alors que l'unité naturelle pour l'action (8.107) est donnée par le produit d'un temps, d'une longueur et d'une force,

$$\tau_{\text{int}} \frac{1}{\kappa} \frac{M v_{zi}}{\tau_{\text{int}}} = \frac{M v_{zi}}{\kappa}. \tag{8.108}$$

La vitesse incidente entre donc dans la phase de la fonction d'onde par le facteur global $M v_{zi}/\hbar\kappa = k_{zi}/\kappa$.

Dans le calcul numérique, nous déterminons les trajectoires classiques pour un certain nombre de positions initiales $(x_i{}^{(l)}, z_i)$, $l = 1, \ldots, N$ dans la région asymptotique. Après un temps de propagation de l'ordre de $2z_i/v_{zi}$, nous obtenons les positions finales $(x_f{}^{(l)}, z_f)$ ainsi que les vitesses $\mathbf{v}_f{}^{(l)}$ et les actions $\Delta S^{(l)}$. Ces résultats permettent de construire la fonction d'onde après l'interaction avec le réseau de diffraction et d'évaluer l'intégrale (8.40) pour les amplitudes de diffraction.

Présentation des résultats

Choix de la position finale. La valeur précise de la position finale z_f est à choisir de façon à ce que, d'une part, l'intégrale (8.107) tienne compte de tout le potentiel, et d'autre part, que les trajectoires classiques ne se croisent pas encore. Ceci est illustré

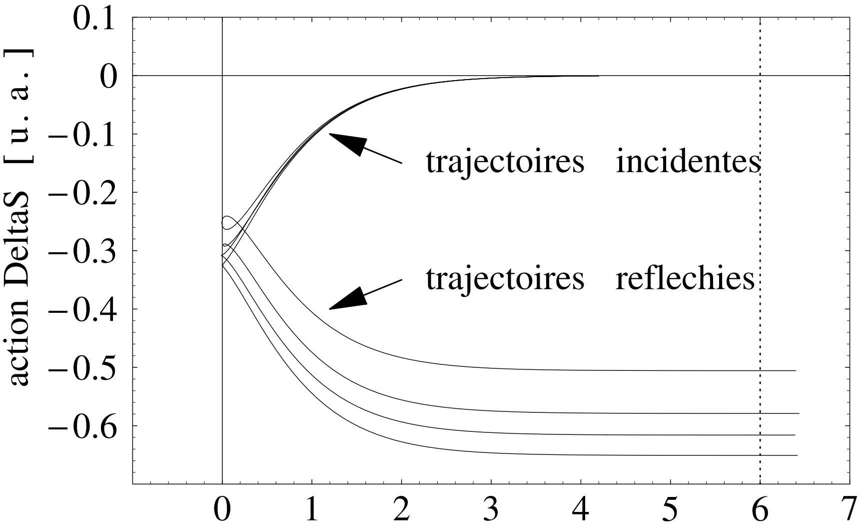

Figure 8.14: Action ΔS (8.107) en fonction de la position finale z_f, calculée avec l'approximation BKW généralisée. L'action atteint sa valeur asymptotique pour $z_f \approx 5 \ldots 6/\kappa$. L'action est donnée en unités naturelles (8.108) pour quelques positions initiales x_i.

par les figures 8.14 et 8.15. Sur la figure 8.14, nous avons représenté l'action ΔS (8.107) en fonction de z_f. Nous constatons qu'elle atteint sa valeur asymptotique si z_f est de l'ordre de quelques $1/\kappa$.

Dans la colonne droite de la figure 8.15, nous montrons la partie modulée de l'action $S(\mathbf{r}_f, t_f|\mathbf{v}_i, t_i)$ en fonction de x_f, pour quelques valeurs de la distance z_f. (Nous avons enlevé l'action constante $S^{(0)}_{\rm out}$ (8.74) venant de la réflexion par l'onde évanescente non modulée.) On constate que l'action présente une modulation à peu près sinusoïdale, et qu'elle est proche du résultat de l'approximation du réseau de phase mince (la courbe en tirets). Lorsque la position z_f s'approche d'une caustique (qui se trouve à $z_{\rm cau} \approx 10/\kappa$ pour les paramètres de la figure), cet accord se détériore. Sur les figures de la colonne gauche, nous constatons que la relation entre les positions finales $x_f^{(l)}$ et les positions initiales s'écarte de plus en plus d'une relation linéaire, en approchant la caustique, jusqu'à ne plus être monotone au-delà de la caustique. A ce moment, les trajectoires classiques se croisent et l'optique géométrique n'est plus valable.

Dans ce qui suit, nous choisissons une distance finale $z_f \approx 5 \ldots 6/\kappa$ pour calculer la figure de diffraction. Pour que les trajectoires atomique réfléchies ne se croisent pas avant cette distance, nous devons restreindre l'espace des paramètres de sorte que la condition suivante soit satisfaite [voir (8.66)] :

$$\epsilon\beta\frac{q^2}{\kappa^2} < \frac{1}{4\kappa z_f} \approx 0.05. \qquad (8.109)$$

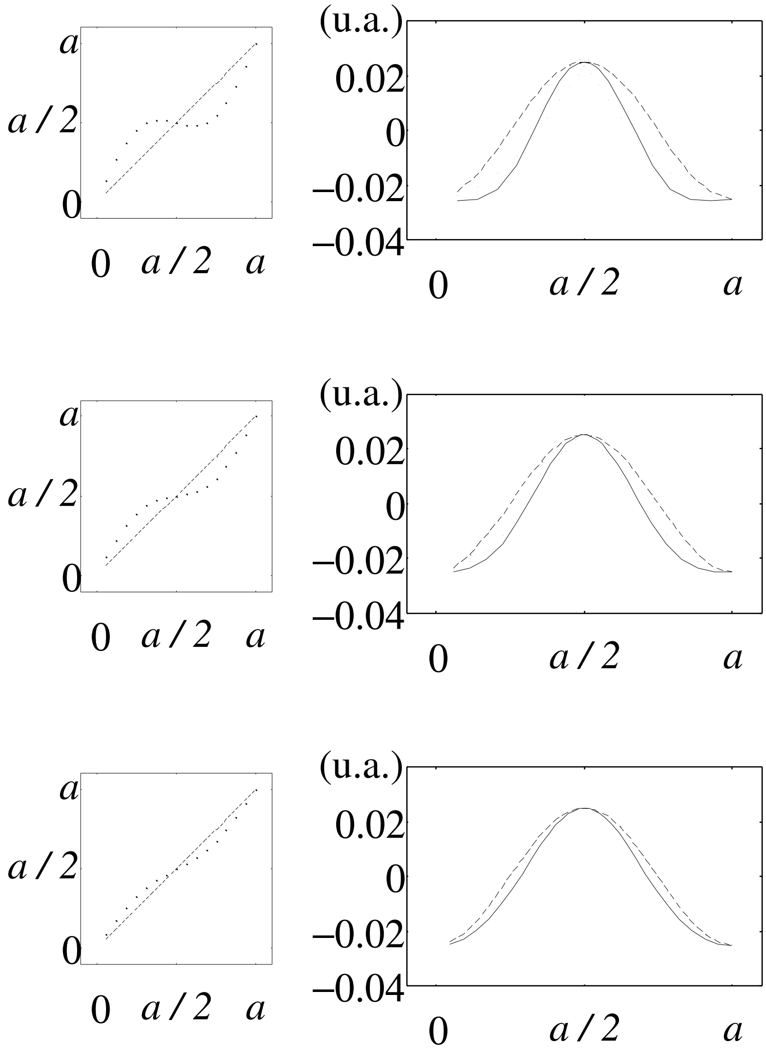

Figure 8.15: Comparaison entre l'action calculée dans l'approche BKW généralisée [équation (8.106)] et l'approximation du réseau de phase mince, pour quelques valeurs de la position finale z_f. Du bas vers le haut : $z_f = z_{\rm reb} + 4/\kappa$, $8/\kappa$, $12/\kappa$.
A gauche : position finale x_f en fonction de la position initiale x_i, pour quelques distances z_f du réseau. Cette relation n'est plus monotone si la position finale se trouve au-delà de la caustique ($z_{\rm cau} \approx 10/\kappa$). Points : approche BKW généralisée, tirets : $x_f = x_i$ (approximation du réseau de phase mince).
A droite : partie modulée de l'action, $S - S^{(0)}$, en fonction de la position finale x_f. Points : approche BKW généralisée [en unités naturelles (8.108)], tirets : approximation du réseau de phase mince, trait plein : modèle empirique (8.110) introduit au paragraphe suivant.
Paramètres : incidence normale, $\epsilon = 0.025$, $q = \kappa$.

Etude du déphasage. Nous étudions maintenant un modèle semi-analytique qui permet d'interpréter la relation entre les approximations du réseau de phase mince et BKW généralisée.

La figure 8.15 nous montre que l'action varie de façon régulière en fonction de x_f avant que la caustique n'apparaisse. Nous constatons en outre que le déphasage donné par l'approche BKW peut être modélisé par l'expression suivante

$$\Delta\varphi_{\mathrm{BKW}}(x_f, z_f) \approx -u_{\mathrm{mod}} \cos 2qx_{\mathrm{reb}} - \eta \sin^2 2qx_{\mathrm{reb}}, \tag{8.110}$$

où le premier terme correspond au déphasage (8.78) donné par l'approximation du réseau de phase mince. L'expression (8.110) est représentée par la courbe en trait fin de la figure 8.15, et nous constatons que l'accord avec le calcul BKW complet est excellent jusqu'à peu avant la caustique. Numériquement, nous avons trouvé que l'amplitude η du deuxième terme dans le modèle (8.110) est donnée, avec une bonne précision, par

$$\eta \simeq u_{\mathrm{mod}}^2 \frac{2q^2}{k_{zi} \cos^2 \theta_i} \left(z_f - z_{\mathrm{reb}}\right). \tag{8.111}$$

Pour motiver ce résultat, nous observons qu'il permet d'écrire le deuxième terme dans (8.110) sous la forme

$$-\eta \sin^2 2qx_{\mathrm{reb}} \simeq -\frac{M}{2\hbar} \left[\Delta v_x^2(x_{\mathrm{reb}}) + \Delta v_z^2(x_{\mathrm{reb}})\right] \left(t_f - t_{\mathrm{reb}}\right), \tag{8.112}$$

où nous avons utilisé les transferts de vitesse au premier ordre $\Delta v_{x,z}(x_{\mathrm{reb}})$ donnés aux équations (6.11, 6.21), et $t_f - t_{\mathrm{reb}} = (z_f - z_{\mathrm{reb}})/v_{zi}$ est le temps nécessaire pour parcourir la distance entre le point de rebroussement z_{reb} et la position finale z_f à la vitesse asymptotique v_{zi}. Nous constatons alors que le deuxième terme du déphasage (8.110) correspond à l'action à l'ordre deux $S^{(2)}$ de la condition de validité (8.52) pour l'approximation du réseau de phase mince. Plus précisément, ce terme est égal à l'erreur de phase $\delta\varphi^{(2)} = -\delta E_{\mathrm{cin}}^{(2)}(t_f - t_{\mathrm{reb}})$ (8.55) qui intervient parce que l'approche perturbative de l'approximation du réseau de phase mince introduit un défaut d'énergie cinétique $\delta E_{\mathrm{cin}}^{(2)}$ (8.54) au deuxième ordre du développement.[23] La condition de validité (8.52) exprime que cette erreur de phase doit rester faible devant l'unité.

Nous nous servons maintenant du modèle (8.110) pour le déphasage de l'approche BKW pour estimer de façon analytique l'influence du terme correctif en $\eta \simeq S^{(2)}/\hbar$ sur les modules et les phases des amplitudes de diffraction. A cet effet, nous négligeons la variation du préfacteur de la fonction d'onde finale $\psi(\mathbf{r}_f)$ (8.35) dans l'intégrale (8.40) pour les amplitudes de diffraction. Les amplitudes $a_n^{(\mathrm{BKW})}$ de l'approche BKW sont alors données par la transformée de FOURIER de la fonction d'onde déphasée $\exp \mathrm{i}\Delta\varphi_{\mathrm{BKW}}$. Or, il en est de même pour les amplitudes de diffraction $a_n^{(\mathrm{r.m.})}$ et

[23] L'expression (8.112) montre que l'intervalle de temps pertinent pour calculer l'erreur de phase $\delta\varphi^{(2)}$ est $t_f - t_{\mathrm{reb}}$ plutôt que le temps d'interaction τ_{int} comme à l'estimation (8.55).

la fonction d'onde $\exp(-\mathrm{i}u_{\mathrm{mod}} \cos 2qx_{\mathrm{reb}})$ dans l'approximation du réseau de phase mince. Les résultats des deux approches sont donc reliés entre eux par une convolution discrète

$$a_n^{(\mathrm{BKW})} = \sum_m c_m \, a_{n-m}^{(\mathrm{r.m.})}, \tag{8.113}$$

où les coefficients c_m donnent le développement de FOURIER du facteur de phase $\exp\left(-\mathrm{i}\eta \sin^2 2qx_{\mathrm{reb}}\right)$ qui provient du terme correctif en η dans le déphasage $\Delta\varphi_{\mathrm{BKW}}$ (8.110) :

$$c_m = \begin{cases} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\eta/2}\, \mathrm{i}^{m/2}\, J_{m/2}(\eta/2), & \text{si } m \text{ pair}, \\ 0, & \text{si } m \text{ impair}. \end{cases} \tag{8.114}$$

Dans le domaine de validité de l'approximation du réseau de phase mince, l'action $S^{(2)}$ est petite devant $\hbar$ et le paramètre η donc faible devant l'unité. Il s'ensuit que les coefficients c_m sont approximativement égaux à $\delta_{m,0}$ et que les amplitudes de diffraction $a_n^{(\mathrm{BKW})}$ dans (8.113) diffèrent peu des $a_n^{(\mathrm{r.m.})}$.

Au premier ordre en η, l'on trouve, en utilisant les amplitudes $a_n^{(\mathrm{r.m.})}$ (8.84) et les relations de recurrence des fonctions de BESSEL[24], que les amplitudes de diffraction (8.113) dans l'approche BKW vérifient

$$a_n^{(\mathrm{BKW})} \approx \left(1 - \mathrm{i}\eta \frac{n^2}{u_{\mathrm{mod}}^2}\right) a_n^{(\mathrm{r.m.})} + (-\mathrm{i})^n \frac{\mathrm{i}\eta}{u_{\mathrm{mod}}} J_n'(u_{\mathrm{mod}}). \tag{8.115}$$

Le facteur en parenthèses du premier terme donne donc une correction de phase[25] à l'amplitude $a_n^{(\mathrm{BKW})}$ qui varie linéairement avec η. Quant aux populations des ordres de diffraction, l'écart entre les approches BKW et du réseau de phase mince est seulement du deuxième ordre en η :

$$\left| w_n^{(\mathrm{BKW})} - w_n^{(\mathrm{r.m.})} \right| \propto \eta^2, \tag{8.116}$$

avec un facteur de proportionnalité de l'ordre de l'unité ; une expression explicite en est donnée à l'équation (**ADif** 31). Nous concluons que la condition de validité $\eta \ll 1$ du réseau de phase mince est surtout pertinente lorsque nous nous intéressons aux phases des amplitudes de diffraction : par rapport à l'approche BKW, l'approximation du réseau de phase mince fait une erreur de phase qui est en effet proportionnelle à η. Les populations de la figure de diffraction, par contre, sont plus « robustes » : comme elles ne s'écartent qu'à l'ordre deux de l'approche BKW, le critère de validité pertinent est $\eta^2 \ll 1$ et permet des valeurs plus élevées du paramètre η.

Le modèle (8.110) pour le déphasage $\Delta\varphi_{\mathrm{BKW}}$ permet aussi d'interpréter comment l'approximation du réseau de phase mince est rendue caduque dans le régime $\eta \gtrsim 1$: plusieurs des coefficients c_m (8.114) sont alors non nuls et la convolution (8.113) montre que les amplitudes de diffraction $a_n^{(\mathrm{r.m.})}$ sont assez différentes de celles données par l'approche BKW qui, elle, a un plus grand domaine de validité.

[24] ABRAMOWITZ et STEGUN, *op. cit.*, formule 9.1.27.

[25] L'on peut montrer que cette correction élimine la dépendance de la position finale z_f des amplitudes de diffraction (8.84) que prédit l'approximation du réseau de phase mince.

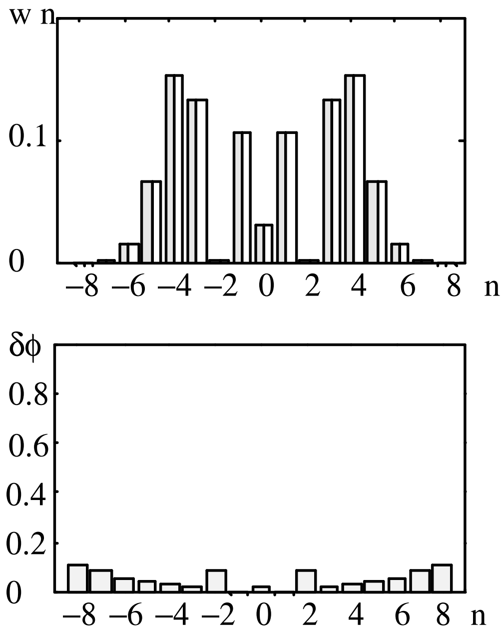

Figure 8.16: Comparaison entre l'approche BKW généralisée et l'approximation du réseau de phase mince.
En haut : figures de diffraction pour un déphasage de la forme (8.110) (barres grises), tel que le donne l'approche BKW généralisée, et un déphasage sinusoïdal (barres blanches), donné par l'approximation du réseau de phase mince. En bas : différences de phase des amplitudes de diffraction. (Les grandes différences de phase aux ordres $n = \pm 2$ *proviennent du fait que l'amplitude de diffraction* $a_2^{(\mathrm{r.m.})}$ *s'annule approximativement et que la dérivée de la fonction de* BESSEL $J_2(u_{\mathrm{mod}})$ *passe par un maximum [voir (8.115)].)*
L'indice de modulation vaut $u_{\mathrm{mod}} = 5$ *et le paramètre* $\eta = 0.05$. *Pour les différences de phase* $\delta\varphi_n = \varphi_n^{(\mathrm{BKW})} - \varphi_n^{(\mathrm{r.m.})}$, *nous avons tracé la fonction* $2|\sin(\delta\varphi_n/2)|$.

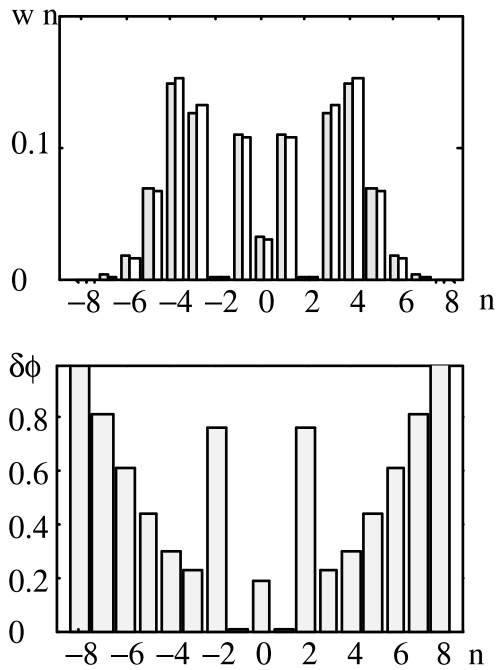

Figure 8.17: Identique à la figure 8.16, mais avec un paramètre η plus près de l'unité ($\eta = 0.5$).

A titre d'illustration, nous comparons sur les figures 8.16 et 8.17 les populations des ordres et les phases des amplitudes de diffraction que l'on obtient avec un déphasage de la forme (8.110), d'une part, et un déphasage sinusoïdal (8.78) tel que le prédit l'approximation du réseau de phase mince, d'autre part. Les deux figures 8.16, 8.17 correspondent au même indice de modulation $u_{\rm mod}$ et à des valeurs différentes pour le paramètre η. Sur la figure 8.16, η est petit devant l'unité, et nous observons que les figures de diffraction sont en très bon accord entre les deux approches ; les différences de phase des amplitudes de diffraction sont relativement faibles, avec un comportement proportionnel à n^2 [voir (8.115)] qui est assez bien vérifié. Pour η plus élevé (la figure 8.17), nous constatons que les différences de phase sont beaucoup plus marquées que les écarts entre les populations des ordres. Ceci confirme notre conclusion que le critère de validité $\eta \ll 1$ concerne davantage les phases des amplitudes de diffraction que les populations des ordres.

Sur les figures 8.18, 8.19 et 8.20, nous présentons une comparaison systématique entre le déphasage donné par l'approche BKW et le modèle (8.110). Les courbes représentent les prédictions de l'approximation du réseau de phase mince pour l'indice de modulation $u_{\rm mod}$ (8.79) (la courbe en tirets) et le paramètre η (8.111) (en pointillées). Pour le déphasage de l'approche BKW, nous avons déterminé les paramètres $u_{\rm mod}$ et η numériquement, en calculant les composantes de FOURIER de $\Delta\varphi_{\rm BKW}(x_f, z_f)$ par rapport à x_f (les pionts sur les figures).

Sur la figure 8.18, $u_{\rm mod}$ et η sont tracés en fonction du contraste ϵ, en incidence nor-

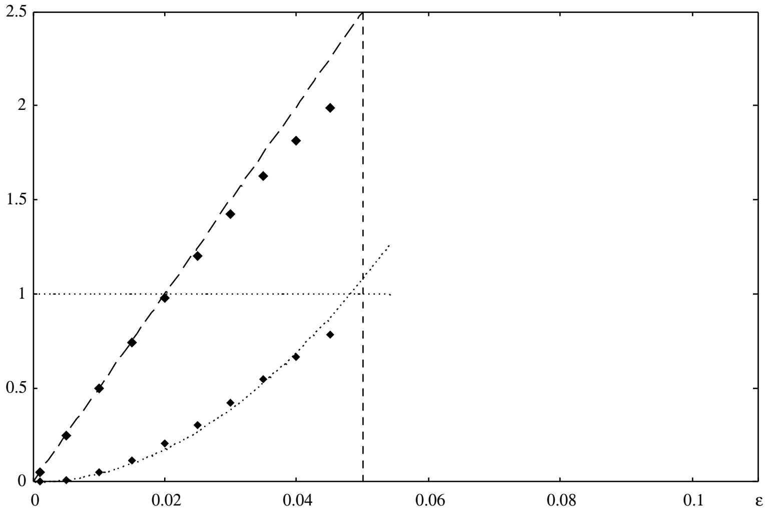

Figure 8.18: Comparaison entre le déphasage donné par l'approche BKW (points) et le modèle (8.110) de l'approximation du réseau de phase mince (courbes en tirets en en pointillées), en fonction du contraste ϵ du réseau, pour l'incidence normale. Tirets : amplitude de modulation du déphasage u_{mod}, pointillées : paramètre η. Paramètres : le vecteur d'onde incident vaut $k_{zi} = 50\,\kappa$, la distance finale $z_f = 5/\kappa$ et $q = \kappa$. Les valeurs du contraste ϵ pour le calcul à l'aide de l'approche BKW sont limitées par la condition (8.109) que les trajectoires ne se croisent pas avant la position finale z_f.

male, et sur la figure 8.19 en incidence oblique. Sur la figure 8.20, le contraste est fixé et c'est l'angle d'incidence θ_i dans le plan xOz du réseau qui varie. Nous constatons que les prédictions analytiques de l'approximation du réseau de phase mince sont en bon accord avec les résultats de l'approche BKW et que c'est effectivement dans la région $\eta \approx 1$ que l'indice de modulation u_{mod} s'écarte de la prédiction de l'approximation du réseau de phase mince.

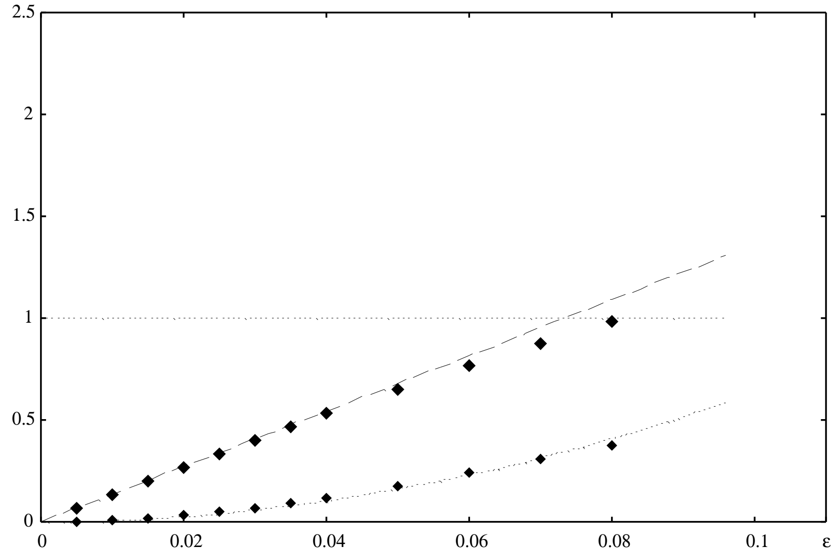

Figure 8.19: Identique à la figure 8.18, mais pour l'incidence oblique avec un angle d'incidence $\theta_i = 45^\circ$ dans le plan xOz du réseau. La composante normale du vecteur d'onde vaut encore $k_{zi} = 50\,\kappa$.

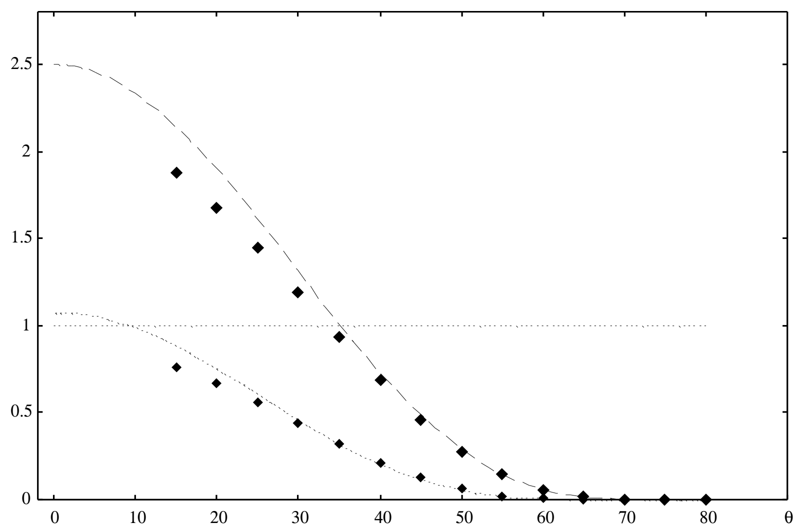

Figure 8.20: Identique à la figure 8.18, mais en fonction de l'angle d'incidence θ_i dans le plan xOz du réseau. Le contraste est fixé à $\epsilon = 0.05$, et le module du vecteur d'onde incident dans le plan xOz vaut $k_i = 50\,\kappa$.

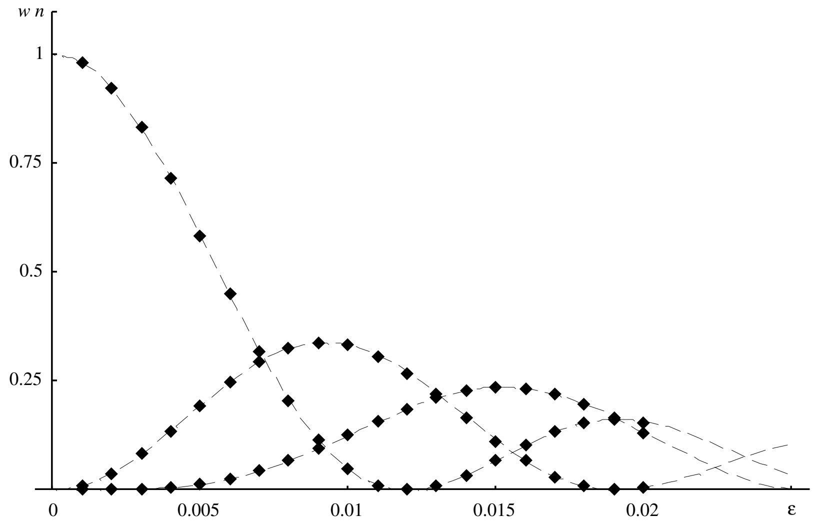

Figure 8.21: Comparaison entre les populations des ordres de diffraction $n = 0, \pm 1, \pm 2$ *données par les approximation BKW et du réseau de phase mince, en fonction du contraste du réseau, pour l'incidence normale.*
Les points représentent les résultats numériques, les courbes en tirets les résultats de l'approximation du réseau de phase mince (8.62). Les populations sont identiques pour les ordres n *et* $-n$.
Paramètres : le vecteur d'onde incident vaut $k_{zi} = 200\,\kappa$, *la distance finale* $z_f = 6/\kappa$ *et* $q = \kappa$.

Populations des ordres de diffraction. Sur les figures 8.21, 8.22 et 8.23, nous présentons les populations des ordres de diffraction $n = 0, \pm 1, \pm 2$ pour un indice de modulation u_{mod} jusqu'à quelques unités. Les figures 8.21 et 8.22 les montrent en fonction du contraste ϵ du réseau, pour deux angles d'incidence différents. Nous constatons pour l'incidence normale (la figure 8.21) que l'approximation du réseau de phase mince est en accord excellent avec le calcul BKW. En incidence oblique, par contre (la figure 8.22), les populations non spéculaires diffèrent légèrement de la prédiction du réseau de phase mince. En particulier, les ordres négatifs avec $n \simeq -u_{\text{mod}}$ (les losanges creux) ont des populations plus élevées que les ordres $n \simeq +u_{\text{mod}}$ (les losanges pleins). Ceci fait écho aux positions asymétriques des pics de la distribution de vitesse classique (voir la figure 6.11 du paragraphe 6.2) : rappelons que le transfert de vitesse classique est plus grand (en module) dans la direction opposée à la direction de propagation de l'atome incident que parallèlement à cette direction. Pour la diffraction, ceci se traduit apparemment par une population plus élevée pour les ordres de diffraction «negatifs» (avec $k_{xf} \simeq k_{xi} - 2u_{\text{mod}}q$) que pour les ordres «positifs» ($k_{xf} \simeq k_{xi} + 2u_{\text{mod}}q$).

Sur la figure 8.23, les populations w_n sont tracées en fonction de l'angle d'incidence dans le plan du réseau. Nous voyons que l'accord entre l'approche BKW

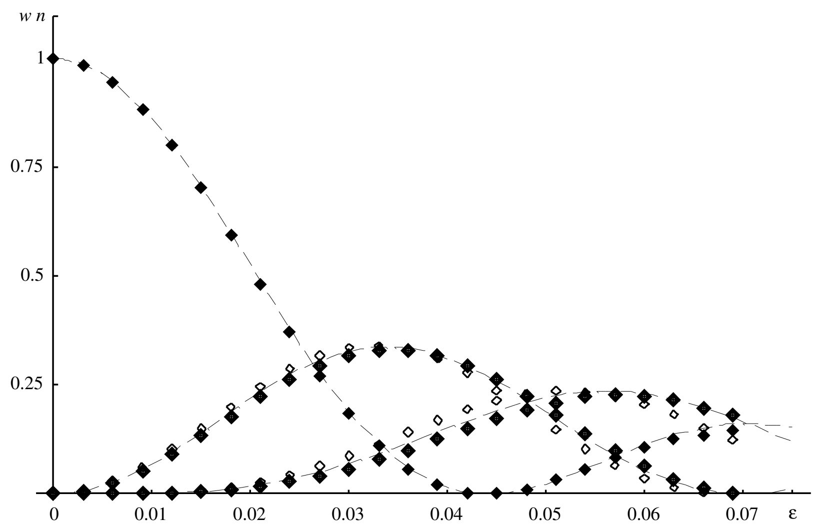

Figure 8.22: Identique à la figure 8.21, mais en incidence oblique $\theta_i = 45°$.
Les losanges pleins (creux) représentent les résultats de l'approche BKW pour les ordres positifs (négatifs). Les courbes en tirets donnent les résultats de l'approximation du réseau de phase mince (8.62) (identiques pour les ordres n et $-n$).
La composante normale du vecteur d'onde incident vaut encore $k_{zi} = 200\,\kappa$.

et l'approximation du réseau de phase mince est excellent autour de l'incidence normale où les populations des ordres n et $-n$ sont identiques. Lorsque l'angle d'incidence augmente, nous voyons apparaître l'écart entre les résultats BKW et du réseau de phase mince pour les populations non spéculaires. (Nous observons également l'asymétrie entre les ordres n et $-n$ dans l'approche BKW, comme sur la figure précédente 8.22.) Par contre, l'approximation du réseau de phase mince reproduit bien l'allure générale de la décroissance des populations non spéculaires lorsque l'on s'approche de l'incidence rasante. Rappelons qu'un tel accord qualitatif apparaît aussi sur la figure 8.13 où nous comparons à l'approximation de BORN.

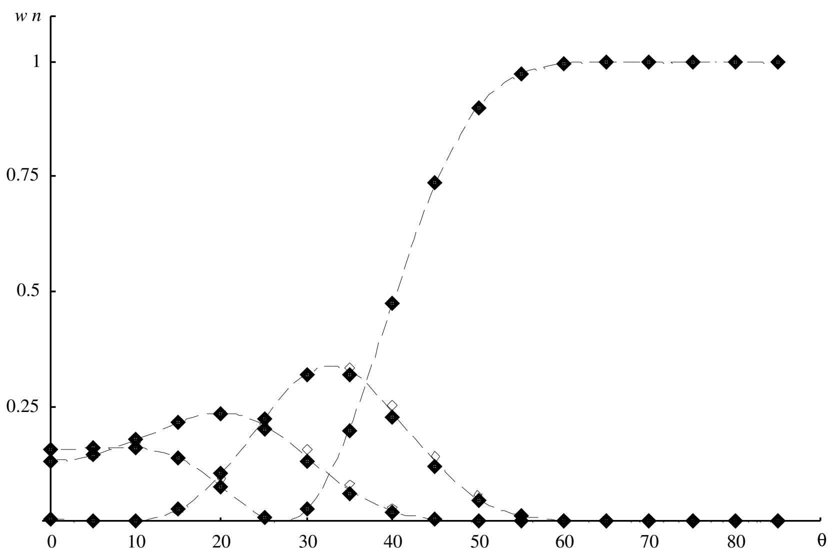

Figure 8.23: Identique à la figure 8.22, mais en fonction de l'angle d'incidence θ_i dans le plan du réseau.
Paramètres : le module du vecteur d'onde incident vaut $k_i = 200\,\kappa$.

8.4.8 Le domaine de validité de l'approximation du réseau de phase mince

Dans ce paragraphe, nous résumons les conditions de validité de l'approximation du réseau de phase mince pour le cas de la diffraction d'atomes par l'onde évanescente stationnaire. Rappelons que nous avons pu trouver ces conditions par comparaison avec d'autres approches dans leurs domaines de validité respectifs. L'approximation de BORN, par exemple, donne *a priori* une description plus précise de la diffraction à la limite d'une modulation de phase faible, parce qu'elle part directement de l'équation de SCHRÖDINGER. Pour que l'approximation du réseau de phase mince soit valable, il faut donc qu'elle rejoigne les résultats de l'approximation de BORN dans cette limite.

Pour le cas de l'incidence normale, nous avons représentés les différentes conditions de validité sur la figure 8.24 qui complète le schéma 7.20 que nous avons introduit à la fin du chapitre 7. Le régime perturbatif $u_{\rm mod} \ll 1$ se trouve dans la partie supérieure du schéma. La partie inférieure représente le régime de modulation de phase forte, et l'approximation du réseau de phase mince a permis de couvrir une partie de ce domaine de paramètres qui est inaccessible à l'approximation de BORN.

La ligne verticale délimite le régime de RAMAN–NATH (8.94) (dans la partie gauche du schéma), où l'approximation linéaire pour les vecteurs d'onde diffractés k_{zn} est légitime. L'approximation du réseau de phase mince n'est valable que dans ce régime. En effet, nous avons vu (voir la figure 8.12) qu'elle ne permet pas de décrire le régime de BRAGG qui se trouve à droite de la ligne verticale.

La ligne diagonale du schéma sépare les régimes du réseau géométriquement mince (en haut à gauche) et épais (en bas à droite). L'approche du réseau de phase mince est limitée à un réseau géométriquement mince parce qu'elle est une approche semi-classique : pour un réseau géométriquement épais, les trajectoires classiques sont focalisées à l'intérieur du réseau [voir le critère (8.66)], et la méthode semi-classique de calculer la phase de la fonction d'onde le long des trajectoires n'est pas justifiée.

Finalement, la ligne courbe correspond à la condition $\eta \simeq S^{(2)}_{\max}/\hbar = 1$ [voir (8.111)], où $S^{(2)}_{\max}$ est l'estimation du terme d'ordre deux dans le développement perturbatif de l'action. Dans la région au-dessus de la courbe, l'action à l'ordre deux $S^{(2)}$ est inférieure à $\hbar$, et l'approximation du réseau de phase mince est valable. Nous rappelons que cette limite est plus stricte pour les phases des amplitudes de diffraction (la condition $\eta \ll 1$) que pour les populations des ordres pour lesquelles le critère pertinent est $\eta^2 \ll 1$.

Nous constatons que dans le régime d'une modulation de phase forte, la condition $\eta < 1$ est plus restrictive que le critère du réseau géométriquement mince. L'approximation du réseau de phase mince permet alors d'entrer dans le domaine non perturbatif $u_{\text{mod}} > 1$ où plusieurs ordres de diffraction sont peuplés ; mais elle est limitée davantage que l'approche semi-classique qui, elle, est valable dans tout le domaine du réseau géométriquement mince, jusqu'à la ligne diagonale.

Remarque. Lorsque l'angle d'incidence s'écarte de la normale, la ligne limite horizontale pour une modulation de phase faible et la ligne diagonale du schéma 8.24 se déplacent vers des contrastes plus élevés, à cause du facteur d'obliquité. En même temps, la ligne verticale se déplace vers la gauche [à cause du facteur $1/\cos^2\theta_i$ dans le critère (8.94)]. Le domaine de validité de l'approximation du réseau de phase mince se déforme donc, se limitant à des réseaux qui sont plus « minces » (avec un rapport q/κ plus petit), mais qui peuvent avoir un contraste plus élevé.

Par contre, lorsque l'on augmente la distance finale z_f à laquelle les amplitudes de diffraction sont calculées, la ligne verticale se déplace vers la gauche (parce les erreurs de phase dues aux valeurs approchées des vecteur d'ondes k_{zn} augmentent), et la ligne courbe se déplace vers le haut (η étant également proportionnel à la distance finale). Le domaine de validité de l'approximation du réseau de phase mince s'en trouve globalement réduit.

8.5 Conclusion et perspectives

Dans le régime semi-classique où la longueur d'onde atomique dans le plan xOz du réseau est petite par rapport aux échelles caractéristiques du potentiel, l'action classique, divisée par la constante de PLANCK $\hbar$, permet d'obtenir la phase de la fonction d'onde après la zone d'interaction. La phase est calculée le long des trajectoires classiques de l'atome. Cette approche semi-classique (ou « BKW généralisée ») permet de caractériser la diffraction lorsque le réseau de diffraction est « géométriquement mince ». Cette condition peut s'exprimer de deux manières équivalentes : ou bien les trajectoires classiques ne s'écartent pas beaucoup des trajectoires non perturbées à

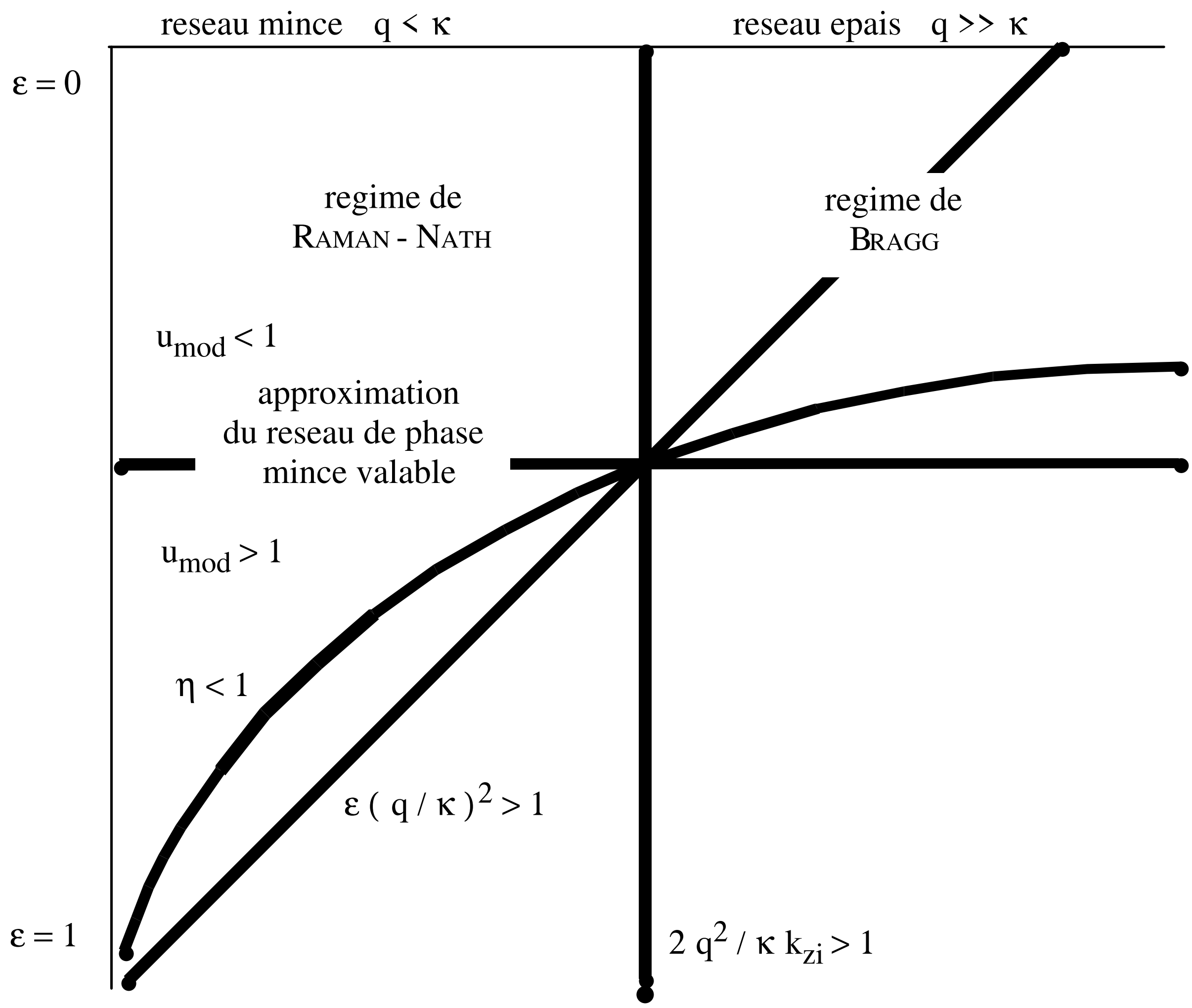

Figure 8.24: Représentation schématique du domaine de validité de l'approximation du réseau de phase mince (à comparer à la figure 7.20).
L'approximation est valable à gauche de la ligne verticale (régime de RAMAN–NATH*) et au-dessus de la ligne courbe (rapport η entre l'action maximale à l'ordre deux et $\hbar$ inférieur à l'unité).*

l'échelle de la période du réseau, ou bien les trajectoires classiques ne se croisent qu'à l'extérieur de la zone d'interaction. Dans ce régime, la variation périodique du potentiel du réseau impose une modulation de phase spatiale à la fonction d'onde qui est à l'origine de la diffraction.

Lorsque la diffraction est due à un potentiel faible, le principe de moindre action implique que l'on peut calculer le déphasage atomique au premier ordre le long des trajectoires non perturbées. Cette approche perturbative procède de façon analogue à un réseau de phase mince de l'optique lumineuse, et c'est pour cette raison que nous l'avons appelée l'«approximation du réseau de phase mince». Pour le cas particulier d'un réseau de diffraction en transmission dont le potentiel est faible devant l'énergie incidente, la méthode du réseau de phase mince donne des résultats équivalents à ceux de l'approximation de RAMAN–NATH.

Par contre, la présentation que nous avons donnée pour l'approximation du réseau de phase mince montre qu'elle permet également d'obtenir des expressions analytiques pour les amplitudes de diffraction pour une onde évanescente stationnaire. Comme dans l'approche perturbative que nous avons suivie dans le chapitre 6, nous calculons la phase atomique au premier ordre dans le contraste le long des trajectoires pour une réflexion simple. La figure de diffraction est alors donnée par une transformée de FOURIER. Sous réserve de certaines conditions, ce résultat rejoint l'approximation de BORN dans la limite d'une modulation de phase faible, et la distribution de vitesse classique dans la limite opposée. La figure de diffraction prédite par l'approximation du réseau de phase mince est symétrique ce qui est une conséquence du fait que les vecteurs d'onde normaux sont déterminés par une approximation linéaire, la conservation de l'énergie n'étant respectée qu'au premier ordre par rapport au vecteur d'onde horizontal q. Par conséquent, cette approche ne peut rendre compte correctement de la diffraction ni dans le régime de BRAGG, ni en incidence rasante. Il va de soi qu'elle ne peut pas caractériser le régime quantique ($k_{zi} \ll \kappa$) parce que la longueur d'onde atomique est alors trop grande pour que l'approche semi-classique puisse être justifiée.

Nous notons que des approches similaires à l'approximation du réseau de phase mince ont été développées de façon indépendante dans d'autres domaines : pour la diffusion de la lumière par une interface rugueuse [116, 117, 118] ou encore dans le contexte de la diffusion d'atomes par des surfaces cristallines [84, 75, 77, 119, 115, 120]. Ces approches ont en commun que ce n'est pas le «champ» (le champ lumineux ou une onde de matière) qui est l'objet d'un développement perturbatif, mais sa phase. Pour réparer le défaut que nous venons d'évoquer, à savoir le traitement approchée de la conservation d'énergie, il a été proposé de choisir différemment la trajectoire classique le long de laquelle l'action est calculée [75, 120]. Il se trouve alors que des trajectoires dont la position change brusquement au point de rebroussement — ou encore des trajectoires complexes — permettent une description plus précise des amplitudes de diffraction.

Finalement, nous voudrions attirer l'attention sur le fait que l'approche du réseau de phase mince peut également être utilisée pour calculer des déphasages dus à des potentiels faibles qui ne sont pas modulés spatialement [71, 72]. Cette situation se présente en particulier dans l'interférométrie atomique, et nous en donnerons deux exemples pour le miroir à onde évanescente.

Le déphasage dû à l'interaction de VAN DER WAALS. Dans la réflexion simple par une onde évanescente, l'atome est soumis aussi à l'interaction de VAN DER WAALS qui, à courte distance du diélectrique, est caractérisée par un potentiel de la forme (2.16)

$$V_{\mathrm{vdW}}(z) = -\frac{c_3}{z^3}. \tag{8.117}$$

Rappelons qu'à une distance de l'ordre de $\lambda_L/2\pi$, l'énergie d'interaction de VAN DER WAALS est généralement de l'ordre de $\hbar\Gamma$, où $1/\Gamma$ est la durée de vie de l'état excité de l'atome [121, 39].

Dans la limite où le potentiel de VAN DER WAALS est une perturbation par rapport au potentiel dipolaire de l'onde évanescente, il conduit à un déphasage φ_{vdW} que nous pouvons évaluer par une intégrale le long de la trajectoire non perturbée $z^{(0)}(t)$:

$$\begin{aligned}\varphi_{\mathrm{vdW}} &= -\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t\, V_{\mathrm{vdW}}[z^{(0)}(t)] \\ &= \frac{2c_3\kappa^3\tau_{\mathrm{int}}}{\hbar}\int_{0}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}x}{(\kappa z_{\mathrm{reb}} + \ln\cosh x)^3}.\end{aligned} \tag{8.118}$$

Pour une distance générique du point de rebroussement, $z_{\mathrm{reb}} \sim 1/\kappa$, le déphasage de VAN DER WAALS est de l'ordre de $\Gamma\tau_{\mathrm{int}}$. L'intégrale sans dimension dans (8.118) dépend de la distance réduite κz_{reb} et est représentée sur la figure 8.25.

Pour mesurer le déphasage φ_{vdW}, l'on peut envisager un interféromètre atomique comme celui du groupe de J. DALIBARD [85], où l'atome est réfléchi plusieurs fois par l'onde évanescente, en faisant varier la hauteur du potentiel dipolaire d'une réflexion à l'autre de sorte que la distance du point de rebroussement z_{reb} change. Une possibilité alternative serait d'utiliser une seule réflexion, mais pour un atome avec plusieurs états magnétiques dans l'état fondamental. Supposons que les états par rapport un axe $\mathbf{e}_1$ sont des états propres du potentiel dipolaire avec des valeurs propres différentes. Ces états sont alors associés à des trajectoires avec des points de rebroussements différents, et à cause du potentiel de VAN DER WAALS, leurs amplitudes de réflexion accumulent des phases différentes. Ceci peut être détecté en mesurant, après la réflexion, les populations des sous-niveaux magnétiques par rapport à un axe différent $\mathbf{e}_2$.

Déphasage d'un potentiel de «jauge». Lorsque nous représentons la fonction d'onde atomique dans la base des niveaux habillés, la variation spatiale de ces états propres du couplage laser–atome ne conduit pas seulement à des couplages «non adiabatiques» entre les différents niveaux habillés[26], mais aussi à un potentiel fictif que

[26] A. MESSIAH, *Mécanique quantique*, nouvelle édition (1995), tome II, chap.XVII, § 13.

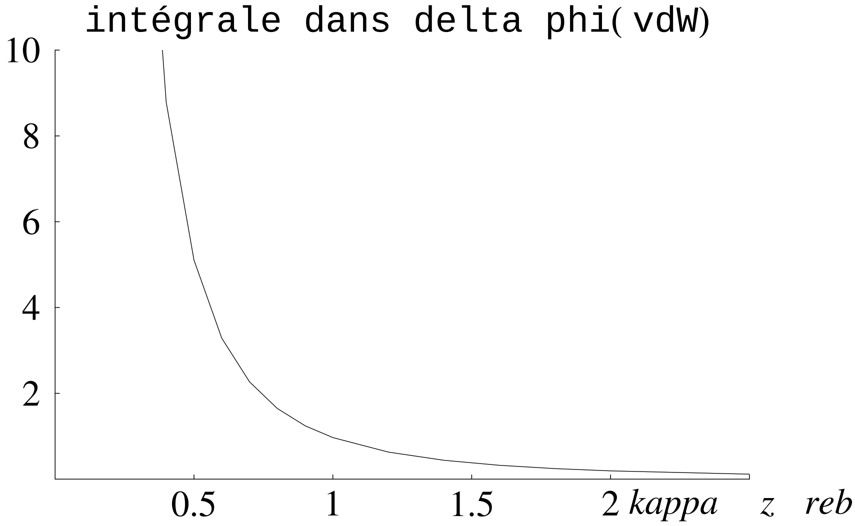

Figure 8.25: Intégrale dans le déphasage de VAN DER WAALS *(8.118) en fonction de la distance réduite $\kappa z_{\rm reb}$ du point de rebroussement. Le déphasage $\varphi_{\rm vdW}$ est obtenu en multipliant avec $2c_3\kappa^3\tau_{\rm int}/\hbar \sim \Gamma\tau_{\rm int}$.*

nous pourrions appeler un «potentiel de jauge» $\Phi(z)$ [122]. Dans la limite de faible saturation et pour une onde évanescente simple, ce potentiel prend la forme[27]

$$\Phi(z) = \frac{\hbar^2\kappa^2}{4M} s_{\max}\, \mathrm{e}^{-2\kappa z} \tag{8.119}$$

où $s_{\max}$ est le paramètre de saturation à l'interface du diélectrique. Le déphasage associé à ce potentiel vaut alors

$$\varphi_\Phi = -\frac{\hbar\kappa}{2Mv_{zi}} s_{\max}\, \mathrm{e}^{-2\kappa z_{\rm reb}} \tag{8.120}$$

Nous notons d'abord qu'il est proportionnel à la constante de PLANCK ce qui est inhabituel puisque les déphasages sont généralement de la forme d'une intégrale «classique», divisée par $\hbar$. Cette dépendance est due ici au potentiel fictif $\Phi(z)$ qui contient le facteur $\hbar^2$. Ensuite, le déphasage φ_Φ est généralement très petit par rapport à l'unité, il semble donc difficile à mettre en évidence.

[27]Le potentiel $\Phi(z)$ est relié à la dérivée seconde des états habillés qui apparaît lorsque l'on exprime l'opérateur d'énergie cinétique $-\hbar^2\nabla^2/2M$ dans la base habillée ; voir par exemple [78].

Annexe

8.A *Atomic diffraction by a thin phase grating* (ADif)

Nous reproduisons ici l'article «*Atomic diffraction by a thin phase grating*» par C. H., J.-Y. COURTOIS et A. ASPECT, paru dans le *Journal de Physique II (France)* **4**, pp. 1955–74 (novembre 1994). Le lecteur y trouvera le calcul détaillé du développement de l'action et des trajectoires classiques. En particulier, les expressions (8.45) et (8.51) pour l'action au premier et second ordre sont démontrées [aux équations (**ADif** 7, 8)], et l'on calcule les amplitudes de diffraction à partir du théorème de HELMHOLTZ–KIRCHHOFF [aux équations (**ADif** B.5–11)].

Une version électronique de ce papier est accessible sur arxiv.org/quant-ph/0408157.

8.B Calcul des amplitudes de diffraction dans le régime du réseau de phase mince

Nous montrons dans cette annexe que dans l'approximation du réseau de phase mince, il est légitime de calculer les amplitudes de diffraction non pas par l'intégrale (8.40) (qui provient du théorème de HELMHOLTZ–KIRCHHOFF), mais par l'intégrale de FOURIER (8.61).

En insérant la fonction d'onde finale (8.35) dans l'intégrale (8.40), nous obtenons

$$\begin{aligned} a_n = \int_0^a \frac{\mathrm{d}x_f}{2a} &\left(1 + \frac{Mv_{zi} + Mv_{zf}^{(1)}(x_f, z_f)}{\hbar k_{zn}}\right) \times \\ &\times A(x_f) \exp \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left[S^{(0)}(x_f, z_f) + S^{(1)}(x_f, z_f)\right] \times \\ &\times \exp \mathrm{i} \left[-2nqx_f - (k_{zn} - k_{zi})z_f\right], \end{aligned} \tag{8.B.1}$$

où $v_{zf}^{(1)}(x_f, z_f)$ est la composante normale du transfert de vitesse au premier ordre et l'amplitude $A(x_f)$ de la fonction d'onde est donnée par

$$A(x_f) = \sqrt{\frac{\partial x_i}{\partial x_f} \frac{\cos\theta_i}{\cos\theta_f}}. \tag{8.B.2}$$

Le produit $\cos\theta_f \, \mathrm{d}x_f$ donne la section finale d'un pinceau de trajectoires centré autour de la trajectoire non perturbée $\mathbf{r}^{(0)}(t)$.

Pour simplifier le facteur d'obliquité de HUYGHENS–FRESNEL [en parenthèses de la première ligne de (8.B.1)], nous notons d'abord que le transfert de vitesse $v_{zf}^{(1)}$ est faible devant la vitesse incidente à cause de la condition de validité (8.52)

$$\left|\frac{v_{zf}^{(1)}}{v_{zi}}\right| \leq \left|\frac{\Delta v_z^{\max}}{v_{zi}}\right| \leq \frac{\sqrt{(\Delta v_x^{\max})^2 + (\Delta v_z^{\max})^2}}{v_{zi}} \overset{(8.52)}{\ll} \sqrt{\frac{2\hbar}{Mv_{zi}^2 \tau_{\mathrm{int}}}} = \sqrt{\frac{2}{k_{zi} w}} \ll 1 \tag{8.B.3}$$

où $\tau_{\mathrm{int}} = w/v_{zi}$ est le temps d'interaction et w est l'épaisseur du réseau ; la dernière inégalité est la conséquence du régime semi-classique.

Pour une figure de diffraction où plusieurs ordres sont peuplés ($n_{\max} > 1$), nous nous attendons à ce que la distribution de vitesse classique donne l'enveloppe de la figure de diffraction. Pour les ordres $|n| \lesssim n_{\max}$ dont les populations sont notables, le même raisonnement montre alors que la composante normale Δk_{zn} du transfert de vecteur d'onde est faible devant le vecteur d'onde incident k_{zi} :

$$\left|\frac{\Delta k_{zn}}{k_{zi}}\right| \lesssim \left|\frac{\Delta v_z^{\max}}{v_{zi}}\right| \ll 1. \tag{8.B.4}$$

Ainsi, les estimations (8.B.3, 8.B.4) permettent de remplacer le facteur d'obliquité de HUYGHENS–FRESNEL dans (8.B.1) par la constante 2. Elles impliquent également que le rapport $\cos\theta_f/\cos\theta_i$ dans le facteur d'amplitude $A(x_f)$ (8.B.2) et dans les populations $w_n = (\cos\theta_f/\cos\theta_i)|a_n|^2$ peut être approximé par l'unité [voir (8.62)].

Notons que l'estimation (8.B.4) n'est plus valable proche de l'incidence rasante parce que la diffraction conduit alors à des transferts de vecteur d'onde $\Delta k_{z,\pm 1}$ comparable à k_{zi}. Dans ce cas, il convient d'utiliser l'expression $1 + k_{zi}/k_{zn}$ pour le facteur d'obliquité, et les populations (8.62) sont alors à corriger par le facteur $(k_{zi} + k_{zn})^2/(4k_{zi}k_{zn})$.

Finalement, pour estimer la dérivée $\partial x_i/\partial x_f$ qui intervient dans le facteur d'amplitude (8.B.2), nous approximons, au premier ordre en ϵ, la trajectoire classique par deux branches[28] : une première en mouvement libre à la vitesse incidente $\mathbf{v}_i$ jusqu'à une «position d'impact» $\mathbf{r}_{\mathrm{imp}}$ où l'atome croise la zone d'interaction située autour de $z = z_{\mathrm{imp}}$, et une deuxième, également en mouvement libre, mais à la vitesse finale $\mathbf{v}_f$. On obtient alors les expressions suivantes pour l'instant d'impact t_{imp} et la position d'impact :

$$t_{\mathrm{imp}} = t_f - (z_f - z_{\mathrm{imp}})/v_{zf}, \tag{8.B.5a}$$

$$x_{\mathrm{imp}} = x_f - v_{xf}(t_f - t_{\mathrm{imp}}). \tag{8.B.5b}$$

En utilisant le transfert de vitesse $\Delta v_x(x_{\mathrm{imp}})$ (qui dépend de la position d'impact), cette construction permet d'établir la relation suivante

$$x_f = x_i + v_{xi}(t_f - t_i) + \Delta v_x(x_{\mathrm{imp}})(t_f - t_{\mathrm{imp}}). \tag{8.B.6}$$

En la dérivant par rapport à x_f, et en estimant la dérivée du transfert de vitesse par $\Delta v_x^{\max}/a$ (où a est la période du réseau), nous obtenons

$$\left|\frac{\partial x_i}{\partial x_f} - 1\right| \lesssim \frac{\Delta v_x^{\max}(t_f - t_{\mathrm{imp}})}{a} = \frac{\Delta x_{\max}}{a}\frac{z_f - z_{\mathrm{imp}}}{w}. \tag{8.B.7}$$

En choisissant une position finale z_f de l'ordre de quelques épaisseurs w du réseau, le membre droit de cette inégalité est petit devant l'unité parce que l'atome se déplace peu dans la zone d'interaction par rapport au pas du réseau à cause de la condition de validité (8.59).

8.C Les phases des amplitudes de diffraction : différence par rapport à l'approximation de BORN

Les résultats (7.33) et (8.84) pour les amplitudes de diffraction dans les approximations de BORN et du réseau de phase mince donnent les phases $\varphi_{\pm 1}$ suivantes, si l'indice de

[28]Cette forme pour la trajectoire classique est à la base de l'approximation «soudaine» (*sudden approximation*) qui est une amélioration de la présente approche perturbative. Cette approximation est utilisée dans la diffusion d'atomes par des surfaces dans le régime semiclassique (voir [120] pour davantage de références à ce sujet).

modulation $u_{\rm mod}$ est petit devant l'unité :

$$\begin{aligned}
\varphi_{\pm1}^{(\rm Born)} &= \tfrac{\pi}{2} + \tfrac{1}{2}\left(\Delta\varphi_{\rm BKW}(k_{zi}) + \Delta\varphi_{\rm BKW}(k_{z,\pm1})\right), && \text{(8.C.8a)}\\
\varphi_{\pm1}^{(\rm r.m.)} &= \tfrac{\pi}{2} + \Delta\varphi_{\rm BKW}(k_{zi}) \pm 2q\tan\theta_i \zeta_{\rm eff}^{(\rm cl)} + \\
&\quad +(k_{zi} \mp 2q\tan\theta_i - k_{z,\pm1})z_f. && \text{(8.C.8b)}
\end{aligned}$$

Pour calculer leur différence, nous développons d'une part les vecteurs d'onde diffractés $k_{z,\pm1}$ jusqu'au deuxième ordre en q [voir (7.57)], et d'autre part le déphasage $\Delta\varphi_{\rm BKW}(k_{z,\pm1})$ jusqu'au deuxième ordre en $\Delta k_{z,\pm1}$. Rappelons à cet effet la relation entre le miroir effectif classique $\zeta_{\rm eff}^{(\rm cl)}$ et le déphasage semi-classique $\Delta\varphi_{\rm BKW}$ [voir (**Pha** 26, **Pha** 29)], ainsi que l'expression explicite du miroir effectif en fonction de k_{zi} (**Pha** 5)

$$\zeta_{\rm eff}^{(\rm cl)} = -\frac{1}{2}\frac{\partial\Delta\varphi_{\rm BKW}}{\partial k_{zi}} = \frac{1}{2\kappa}\ln\left(\frac{MV_{\rm max}}{2\hbar^2 k_{zi}^2}\right). \tag{8.C.9}$$

En remplaçant $(\Delta k_{z,\pm1})^2 \approx (2q\tan\theta_i)^2$, ce qui est justifié à cet ordre du développement, nous obtenons alors

$$\varphi_{\pm1}^{(\rm Born)} - \varphi_{\pm1}^{(\rm r.m.)} \approx +\frac{2q^2}{k_{zi}\cos^2\theta_i}\zeta_{\rm eff}^{(\rm cl)} + \frac{2q^2\tan^2\theta_i}{\kappa k_{zi}} - \frac{2q^2}{k_{zi}\cos^2\theta_i}z_f. \tag{8.C.10}$$

Nous trouvons alors la différence de phase donnée en (8.97).

Chapitre 9

La diffraction d'atomes par l'onde évanescente stationnaire dans le régime de BRAGG

Introduction

Lorsqu'une onde est diffractée par un potentiel périodique infini et indépendant du temps, les ondes secondaires diffusées par le potentiel interfèrent de façon constructive seulement dans certaines directions de l'espace et seulement pour certaines directions de l'onde incidente (la condition de BRAGG). Ceci est une conséquence du fait que le potentiel périodique ne transfère à l'onde incidente que des vecteurs d'onde discrets et que l'onde diffractée doit avoir la même fréquence que l'onde incidente. Nous pouvons interpréter ce phénomène par la conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie : la diffraction n'a lieu que dans des géométries particulières où un transfert de quantité de mouvement venant du réseau réciproque du potentiel permet de conserver l'énergie. Cependant, si le potentiel périodique a une extension spatiale limitée, les vecteurs d'onde de son réseau réciproque acquièrent une dispersion non nulle, et par conséquent, la conservation de la quantité de mouvement devient moins contraignante.

Considérons à titre d'exemple la diffraction d'atomes par un réseau en transmission en incidence normale. Si le réseau est mince, il contient une grande dispersion de vecteurs d'onde dans la direction longitudinale (la direction de propagation de l'onde atomique incidente) et peut donc transférer à l'onde diffractée la composante de vecteur d'onde longitudinale nécessaire à la conservation d'énergie (voir la figure 9.1 à gauche). C'est donc pour un réseau mince que l'on peut observer la diffraction d'atomes dans le régime de RAMAN–NATH (voir au paragraphe 8.2), c'est-à-dire une figure de diffraction où plusieurs ordres sont peuplés [42, 108].

Si par contre le réseau est épais (la figure 9.1 à droite), les composantes longitudinales des vecteurs d'ondes du réseau sont mieux définies et la diffraction n'est efficace que lorsque les ondes atomiques incidente et diffractée ont le même vecteur

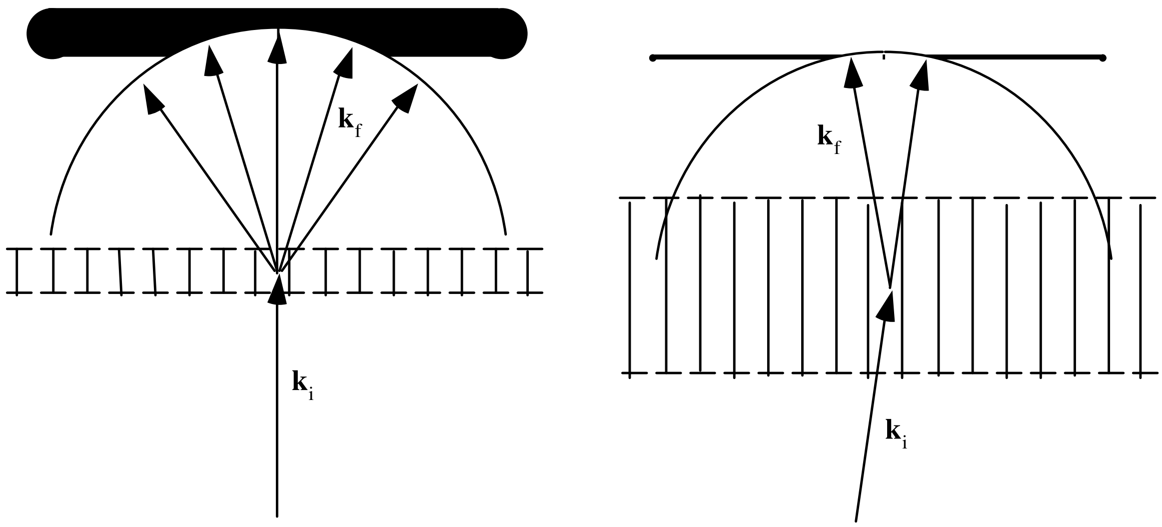

Figure 9.1: Vecteurs d'ondes atomiques diffractés dans les régimes de RAMAN–NATH *(à gauche) et de* BRAGG *(à droite). La largeur de la bande grise représente la dispersion des vecteurs d'onde longitudinaux du réseau de diffraction, elle est inversement proportionnelle à l'épaisseur du réseau.*

d'onde longitudinal. Pour satisfaire à la conservation d'énergie, il faut alors que les vecteurs d'onde incident et diffracté forment la géométrie particulière représentée sur la figure 9.1. L'angle d'incidence θ_B et le vecteur d'onde incident k_i sont donc reliés par la condition de BRAGG

$$k_i \sin\theta_B = m\frac{\pi}{a} \tag{9.1}$$

où a est la période du réseau et $m = 1, 2, \ldots$ l'ordre de la résonance de BRAGG ($m = 1$ sur la figure). Rappelons que k_i est le module du vecteur d'onde atomique dans le plan de diffraction.

A la résonance de BRAGG, deux ordres de diffraction sont couplés entre eux de façon résonnante. Comme pour un atome à deux niveaux, leurs populations présentent alors des oscillations en fonction de l'épaisseur du réseau et de la force de couplage. Ces oscillations sont dues au transfert de population cohérent induit par le réseau de diffraction. Dans le contexte de la diffraction de la lumière ou des neutrons par un réseau épais, ce phénomène s'appelle la «solution du pendule» (*Pendellösung*) [123].

Pour la diffraction d'atomes par une onde lumineuse stationnaire en transmission (l'effet KAPITZA–DIRAC), le régime de BRAGG a été étudié plusieurs fois dans la littérature, du point de vue théorique ainsi qu'expérimental : du côté théorique, citons à ce sujet A. F. BERNHARDT et B. W. SHORE qui ont déjà fait la distinction entre les régimes de RAMAN–NATH et de BRAGG en 1981 [45]. Plus récemment, le groupe de P. MEYSTRE a analysé le rôle de l'émission spontanée à la résonance de BRAGG [49] ; M. MARTE et S. STENHOLM ont interprété les résonances de BRAGG (9.1) en termes de transitions à plusieurs photons [124] ; le groupe de D. WALLS a considéré la dif-

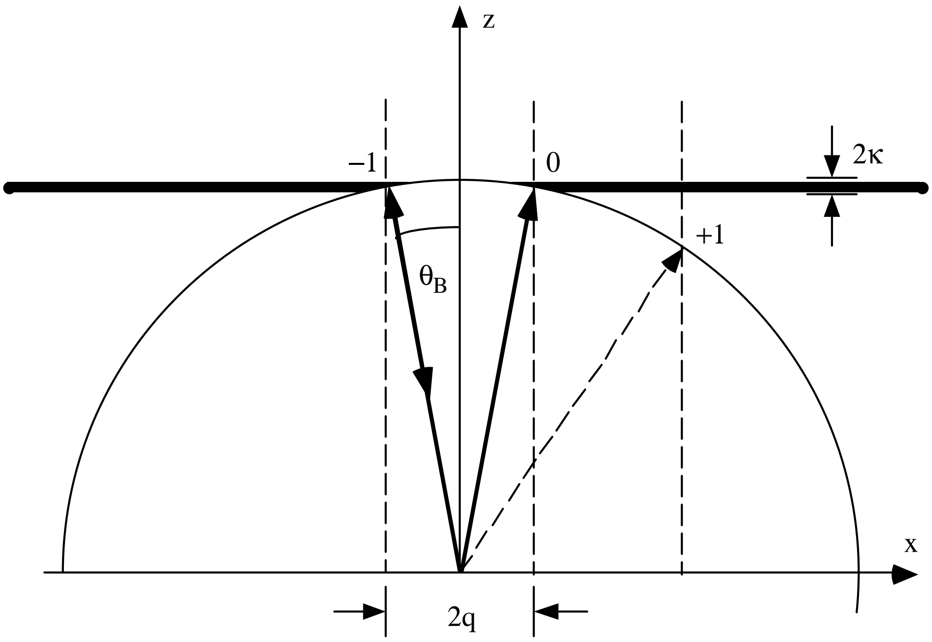

Figure 9.2: Résonance de BRAGG *entre les ordres de diffraction* $n = 0, -1$.

fraction de BRAGG d'un faisceau atomique dont la densité est telle qu'il faut le décrire par un champ quantique [50] ; et le groupe de H. RITSCH a étudié la diffraction de BRAGG dans un régime où l'énergie de recul est beaucoup plus grande que la largeur naturelle de la transition atomique [125].

Du côté expérimental, la première observation de la diffraction d'atomes en transmission et dans le régime de BRAGG a été faite par le groupe de D. PRITCHARD en 1988 [47]. L'effet a été étudié de nouveau pour des atomes plus lents (en chute libre au lieu d'un faisceau thermique) par le groupe de G. REMPE où plusieurs périodes de la *Pendellösung* ont pu être observées [53]. Finalement, citons l'interféromètre à atomes du groupe de S. A. LEE [126] où la diffraction de BRAGG sert de séparatrice en créant une superposition cohérente de deux ondes atomiques qui se propageant dans des directions différentes ; et les travaux du groupe de A. ZEILINGER sur la diffraction de BRAGG par une onde stationnaire modulée temporellement [52], d'une part, et leur mise en évidence des ondes atomiques stationnaires à l'intérieur du réseau de lumière en utilisant l'émission spontanée [127].

En revenant maintenant à la diffraction par l'onde évanescente stationnaire, rappelons que nous avons identifié le régime de BRAGG au paragraphe 7.3.3, en étudiant l'influence du facteur d'obliquité $\beta(\Delta k_{z,\pm1}/\kappa)$ sur les populations $w_{\pm1}$ dans l'approximation de BORN. A la résonance de BRAGG (9.1), l'onde atomique diffractée dans l'ordre $n = -1$ se propage dans le sens inverse de l'onde incidente, comme pour un réseau optique dans un montage de type LITTROW (voir la figure 9.2). Dans cette géométrie, le transfert normal de vecteur d'onde $\Delta k_{z,-1}$ s'annule. Par contre, le transfert $\Delta k_{z,+1}$ pour l'ordre $n = +1$ est différent de zéro, et dans le régime de BRAGG, il est beaucoup plus grand que la constante de décroissance κ (qui donne la dispersion des composantes normales des vecteurs d'onde du réseau de diffraction, voir la bande grise sur la figure 9.2). La population w_{+1} est alors beaucoup plus petite que celle de l'ordre $n = -1$. Nous rappelons que le régime de BRAGG est caractérisé par la condition (7.53)

$$\frac{2q^2}{\kappa k_{zi}} \gtrsim 1, \tag{9.2}$$

qui impose en particulier que l'épaisseur $1/\kappa$ du réseau de diffraction soit beaucoup plus grande que sa période $a = \pi/q$. Ce régime peut être réalisé expérimentalement en utilisant un faisceau lumineux en réflexion totale interne près de l'angle limite. L'on crée alors une onde évanescente avec une longueur de décroissance beaucoup plus grande que la longueur d'onde optique. Cependant, l'on ne peut s'approcher arbitrairement près de l'angle limite pour des raisons techniques, de sorte qu'il faut également préparer les atomes avec une vitesse incidente assez basse (de l'ordre de quelques vitesses de recul) pour satisfaire au régime (9.2). La diffraction de BRAGG d'atomes en réflexion par l'onde évanescente présente donc des difficultés expérimentales et c'est pourquoi elle n'a pas encore été observée à notre connaissance.

En ce qui concerne la description théorique de la diffraction de BRAGG, le couplage résonnant entre les ordres $n = 0$ et $n = -1$ suggère de décomposer la fonction d'onde atomique sur une base d'«ondes partielles» qui sont associées chacune à un ordre de diffraction et couplées entre elles par le réseau. Mathématiquement, cette décomposition transforme l'équation de SCHRÖDINGER en un système (généralement infini) d'équations couplées que l'on appelle habituellement les *équations d'ondes couplées*. En nous limitant aux deux ondes partielles qui sont couplées entre elles de façon résonnante, nous obtenons un système d'équations fermé que nous résolvons de façon analytique.

9.1 Les équations d'ondes couplées de la diffraction

Nous présentons d'abord le calcul qui conduit aux équations d'ondes couplées. Comme le potentiel dipolaire de l'onde évanescente stationnaire est périodique dans la direction horizontale Ox, le théorème de BLOCH–FLOQUET [128] nous permet d'écrire la fonction d'onde atomique sous la forme

$$\psi(x, z) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_{xi}x}\chi(x, z) \tag{9.3}$$

où l'«onde de BLOCH» $\chi\,(x, z)$ est périodique en x avec la période $a = \pi/q$ du réseau. En développant $\chi\,(x, z)$ en une série de FOURIER par rapport à la variable x, la fonction d'onde atomique peut être représentée sous la forme

$$\psi(x, z) = \sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_{xn}x}\chi_n(z) \tag{9.4}$$

où les $k_{xn} = k_{xi} + 2nq$ sont les composantes horizontales des vecteurs d'onde diffractés [comme à l'équation (7.4)]. Les *ondes partielles* $\chi_n(z)$ sont maintenant à déterminer à partir de l'équation de SCHRÖDINGER.

En insérant le développement (9.4) dans l'équation de SCHRÖDINGER (7.10) et en comparant les coefficients de FOURIER pour chaque exponentielle $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_{xn}x}$, nous trouvons le système d'équations suivant

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + k_{zn}^2 - U\mathrm{e}^{-2\kappa z}\right)\chi_n(z) = \frac{\epsilon}{2}U\mathrm{e}^{-2\kappa z}\left\{\chi_{n-1}(z) + \chi_{n+1}(z)\right\}$$
$$n = 0, \pm 1, \ldots \tag{9.5}$$

où k_{zn} est la composante normale du vecteur d'onde diffracté [donnée à (7.5)] et nous avons de nouveau utilisé la notation $U = 2MV_{\max}/\hbar^2$ introduite en (7.26). Les équations (9.5) s'appellent les *équations d'ondes couplées*.

Les conditions asymptotiques (7.12) pour la fonction d'onde $\psi(x, z)$ se traduisent par les conditions suivantes pour les ondes partielles $\chi_n(z)$

$$z \to +\infty : \quad \chi_n(z) = \delta_{n,0} \exp\left(-\mathrm{i}k_{zn}z\right) + a_n \exp\left(\mathrm{i}k_{zn}z\right) \tag{9.6a}$$
$$z \to -\infty : \quad \chi_n(z) \to 0 \tag{9.6b}$$

où $\delta_{n,0}$ est le symbôle de KRONECKER. Nous rappelons que la première de ces équations exprime que l'onde spéculaire $n = 0$ contient une onde plane incidente d'amplitude égale à l'unité. En outre, les amplitudes de diffraction a_n sont définies par le développement (9.6a). La deuxième condition correspond à la décroissance de la fonction d'onde dans la région classiquement interdite.

Formellement, nous pouvons interpréter les équations couplées (9.5) comme décrivant un atome à plusieurs niveaux n dont les énergies sont données par l'énergie cinétique $(\hbar^2/2M)k_{xn}^2$. Ceci est illustré sur la figure 9.3. Dans ce point de vue, le réseau de diffraction couple un niveau n aux niveaux voisins $n \pm 1$. Les conditions asymptotiques (9.6) expriment que l'atome entre dans la zone d'interaction dans l'état $n = 0$ et qu'il en sort avec des amplitudes de probabilité a_n pour les états n.

Notons que les équations (9.5) présentent la difficulté particulière que le potentiel (au membre gauche) ainsi que le terme ce couplage entre les ondes partielles (au membre droit) dépendent de la position z. En ceci, notre situation diffère d'un réseau optique où l'indice de réfraction est constant en fonction de z, au moins par tranches. Pour une description de la diffraction à l'aide des équations d'ondes couplées dans le contexte optique, nous renvoyons au livre de PETIT[1]. La diffraction d'atomes par une surface cristalline a été étudiée par ce moyen par CABRERA, GOODMAN, CELLI et MANSON [58], ainsi que par WOLKEN [131] ; le groupe de D. WALLS a présentée une solution numérique des équations d'ondes couplées pour la diffraction d'atomes par un réseau de lumière [132]. Nous allons poursuivre ici une approche analytique en nous concentrant sur la résonance de BRAGG.

[1] R. PETIT, *Ondes électromagnétiques* (Masson, Paris, 1989). Voir aussi R. PETIT (éditeur), *Electromagnetic Theory of Gratings*, Topics in Current Physics t. 22 (Springer 1980)

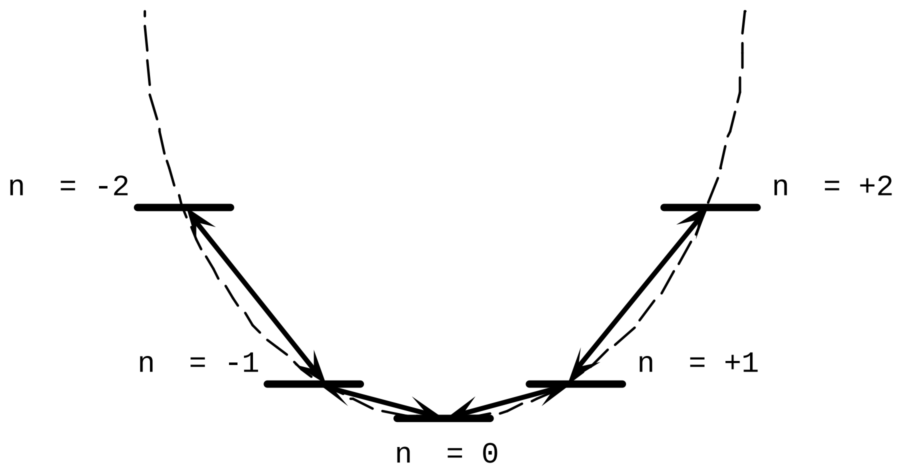

Figure 9.3: Interprétation des équations d'ondes couplées (9.5) en termes d'un atome à plusieurs niveaux. L'atome est incident en incidence normale, et la parabole (en tirets) représente l'énergie cinétique associée aux ordres de diffraction n.

9.2 Solution approchée à la résonance de BRAGG

Dans ce paragraphe, nous étudions la diffraction d'atomes dans le régime de BRAGG à l'aide des équations d'ondes couplées (9.5). Cette approche est particulièrement bien adaptée à ce problème parce que contrairement à l'approximation du réseau de phase mince du chapitre 8, elle tient compte d'emblée de la conservation d'énergie pour fixer les vecteurs d'ondes diffractés k_{zn}. En outre, nous savons de l'approximation de BORN que dans le régime de BRAGG (9.2), le couplage vers l'ordre $n = +1$ est beaucoup plus petit que celui vers l'ordre $n = -1$ et nous pouvons donc limiter les équations couplées aux seuls ordres $n = 0, -1$. En résolvant ce système réduit, nous verrons qu'il est possible d'aller au-delà de l'approximation de BORN et d'étudier la limite non perturbative [voir l'équation (7.66)]

$$\epsilon \gtrsim \frac{2\kappa}{k_{zi}} \tag{9.7}$$

où le résultat (7.64) de l'approximation de BORN pour la population w_{-1} serait plus grand que l'unité.

Cette approche est limitée parce que nous négligeons les couplages vers les ordres $n = +1$ et $n = -2$. Nous pouvons en établir un critère de validité quantitatif en estimant les populations de ces ordres. Nous nous servirons à cet effet d'un calcul itératif dans l'esprit de celui que nous avons suivi au paragraphe 7.2.

9.2.1 Calcul à l'intérieur des ordres fortement couplés

Les équations couplées (9.5) pour les ondes partielles $\chi_0(z)$ et $\chi_{-1}(z)$ s'écrivent

$$\left\{\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + k_{zi}^2 - U\mathrm{e}^{-2\kappa z}\right\}\begin{pmatrix} \chi_{-1}(z) \\ \chi_0(z) \end{pmatrix} =$$
$$\frac{\epsilon}{2}U\mathrm{e}^{-2\kappa z}\begin{pmatrix} \chi_0(z) \\ \chi_{-1}(z) \end{pmatrix} + \frac{\epsilon}{2}U\mathrm{e}^{-2\kappa z}\begin{pmatrix} \chi_{-2}(z) \\ \chi_1(z) \end{pmatrix} \tag{9.8}$$

Dans cette équation, nous négligeons maintenant le terme du deuxième membre qui fait intervenir les ordres -2 et $+1$, afin d'obtenir un système d'équations fermé pour les ordres -1 et 0. Du point de vue de l'atome à plusieurs niveaux, nous nous sommes ainsi restreint à deux niveaux qui sont dégénérés en énergie et qui sont couplés entre eux de façon résonnante par le réseau de diffraction.

Le système d'équations pour les ordres résonnants peut être résolu de façon exacte en calculant d'abord deux solutions indépendantes «symétriques» et «antisymétriques»

$$\begin{pmatrix} \chi_{-1}(z) & = & \eta_+(z) \\ \chi_0(z) & = & \eta_+(z) \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} \chi_{-1}(z) & = & -\eta_-(z) \\ \chi_0(z) & = & \eta_-(z). \end{pmatrix} \tag{9.9}$$

Nous choisissons ensuite une superposition de ces deux solutions de façon à satisfaire à la condition asymptotique (9.6a).

En insérant les expressions (9.9) dans le système (9.8), on trouve que les fonctions $\eta_\pm(z)$ vérifient des équations non couplées

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + k_{zi}^2 - U'_\pm\mathrm{e}^{-2\kappa z}\right)\eta_\pm(z) = 0. \tag{9.10}$$

Ces équations sont de la même forme que l'équation de SCHRÖDINGER (en une dimension) pour le potentiel exponentiel non modulé, à l'exception près que sur le plan $z = 0$, le potentiel vaut

$$U'_\pm \equiv (1 \pm \epsilon/2)\, U. \tag{9.11}$$

Nous connaissons donc les solutions $\eta_\pm(z)$ de (9.10) qui décroissent dans la région classiquement interdite $z \to -\infty$, comme l'exige la condition asymptotique (9.6b).

Dans la région asymptotique $z \to +\infty$, ces solutions ont le comportement [voir (7.23)]

$$z \to +\infty : \qquad \eta_\pm(z) = \sin\left[k_{zi}z + \tfrac{1}{2}\Delta\varphi'_\pm(\epsilon)\right], \tag{9.12}$$

où les déphasages $\Delta\varphi'_\pm(\epsilon)$ diffèrent du déphasage $\Delta\varphi_0 \equiv \Delta\varphi(k_{zi})$ pour la réflexion spéculaire, à cause de (9.11) :

$$\Delta\varphi'_\pm(\epsilon) = \Delta\varphi_0 - \frac{k_{zi}}{\kappa}\ln(1 \pm \epsilon/2)\,. \tag{9.13}$$

Pour satisfaire à la condition asymptotique (9.6a), nous cherchons une combinaison linéaire des solutions (9.9)

$$\begin{pmatrix} \chi_{-1}(z) \\ \chi_0(z) \end{pmatrix} = \alpha_+ \begin{pmatrix} \eta_+(z) \\ \eta_+(z) \end{pmatrix} + \alpha_- \begin{pmatrix} -\eta_-(z) \\ \eta_-(z) \end{pmatrix}. \tag{9.14}$$

En utilisant le développement asymptotique (9.12), nous trouvons un système linéaire pour les coefficients $\alpha_\pm$ dont la solution est donnée par

$$\alpha_\pm = -\mathrm{i}\exp\left[\tfrac{\mathrm{i}}{2}\Delta\varphi'_\pm(\epsilon)\right]. \tag{9.15}$$

Les amplitudes de diffraction valent alors

$$a_{-1} = -\tfrac{1}{2}\left[\exp \mathrm{i}\Delta\varphi'_+(\epsilon) - \exp \mathrm{i}\Delta\varphi'_-(\epsilon)\right] \tag{9.16a}$$
$$a_0 = -\tfrac{1}{2}\left[\exp \mathrm{i}\Delta\varphi'_+(\epsilon) + \exp \mathrm{i}\Delta\varphi'_-(\epsilon)\right] \tag{9.16b}$$

et il s'ensuit que les populations des ordres $n = -1, 0$ de la figure de diffraction atomique sont données par

$$w_{-1} = \sin^2\left[\frac{k_{zi}}{2\kappa}\ln\left(\frac{1+\epsilon/2}{1-\epsilon/2}\right)\right] \tag{9.17a}$$
$$w_0 = \cos^2\left[\frac{k_{zi}}{2\kappa}\ln\left(\frac{1+\epsilon/2}{1-\epsilon/2}\right)\right] \tag{9.17b}$$

Ce résultat est représenté sur la figure 9.4.

Remarque. Pour interpréter les valeurs $U'_\pm$ (9.11) de la hauteur du potentiel exponentiel pour les solutions symétrique et antisymétrique, nous notons que la solution symétrique $\eta_+(z)$ correspond à une onde stationnaire atomique dans la direction Ox

$$\psi_+(x,z) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}qx}\chi_0(z) + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx}\chi_{-1}(z) = 2\cos qx\ \eta_+(z) \tag{9.18}$$

dont les ventres ($x = p\pi/q$ avec p un entier) coïncident avec les « crêtes » du potentiel du réseau. (Voir la densité de probabilité de $\psi_+(x,z)$ représenté sur la figure 9.5.) La valeur moyenne du potentiel, pondérée avec la densité de probabilité de l'onde atomique stationnaire, est donc plus grande que pour une densité atomique uniforme. Ceci explique la valeur augmentée $U'_+ > U$ du potentiel pour l'état symétrique $\psi_+(x,z)$.

La situation est renversée pour la solution antisymétrique $\eta_-(z)$ où $U'_- < U$: les ventres de l'onde atomique stationnaire coïncident alors avec les nœuds de l'onde évanescente stationnaire. La probabilité de présence de l'atome est donc concentrée aux « fonds des vallées » du potentiel, et en moyenne, l'atome est soumis à un potentiel moins élevé.

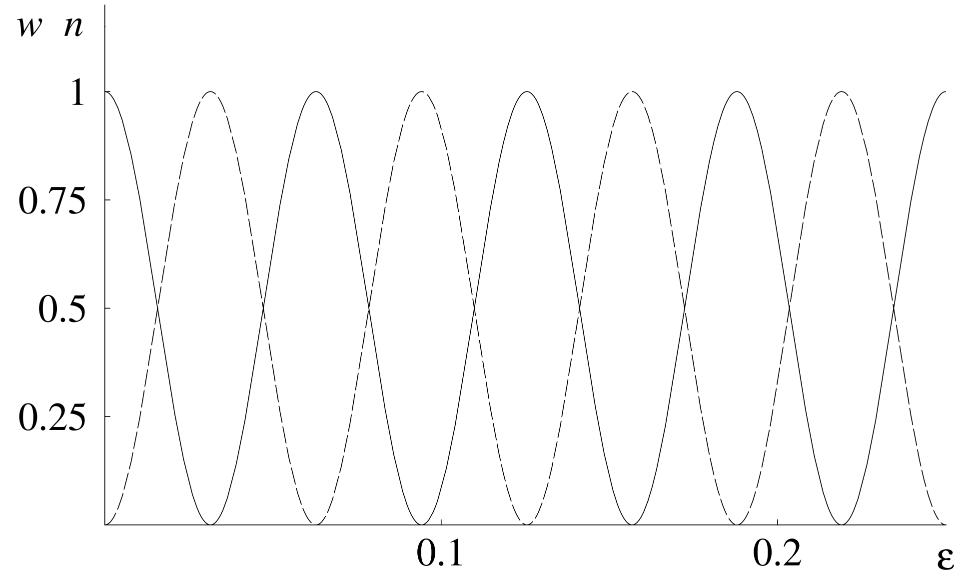

Figure 9.4: Populations (9.17) des ordres de diffraction $n = -1$ (tirets) et $n = 0$ (trait plein) en fonction du contraste ϵ. La composante normale du vecteur d'onde incident vaut $k_{zi} = 100\,\kappa$ et la période (9.20) du «pendule» $\Delta\epsilon = \pi/50 \approx 0.063$.

9.2.2 Etude des populations fortement couplées

On constate sur la figure 9.4 que la diffraction fait basculer la population atomique entre l'ordre spéculaire et l'ordre $n = -1$. Pour un contraste ϵ faible devant l'unité, nous pouvons développer le logarithme dans (9.17) pour trouver que ce basculement s'effectue de façon périodique en fonction de ϵ

$$\epsilon \ll 1 \ : \quad \left\{ \begin{array}{ccl} w_{-1} & \approx & \frac{1}{2}\left[1 - \cos\left(2\pi\epsilon/\Delta\epsilon\right)\right] \\ w_0 & \approx & \frac{1}{2}\left[1 + \cos\left(2\pi\epsilon/\Delta\epsilon\right)\right] \end{array} \right. \tag{9.19}$$

avec une période $\Delta\epsilon$ donnée par

$$\Delta\epsilon = \frac{2\pi\kappa}{k_{zi}}. \tag{9.20}$$

Nous notons que dans le régime semiclassique $k_{zi} \gg \kappa$, la période d'oscillation est petite devant l'unité. De faibles variations du contraste sont alors suffisantes pour faire basculer la population d'un ordre vers l'autre. Par exemple, un contraste égal à la moitié de la période, $\epsilon = \Delta\epsilon/2 = \pi\kappa/k_{zi}$, correspond à un «pulse π» où toute la population est transférée de l'ordre $n = 0$ vers $n = -1$. Un autre exemple est celui d'un contraste $\epsilon = \Delta\epsilon/4$ (un «pulse $\pi/2$»), la diffraction crèe alors une superposition à poids égales des ordres $n = 0$ et $n = -1$.

Les oscillations des populations sont l'analogue de la *Pendellösung* dans la diffraction d'une onde (ou bien électromagnétique ou bien de matière [123, 47, 53, 127])

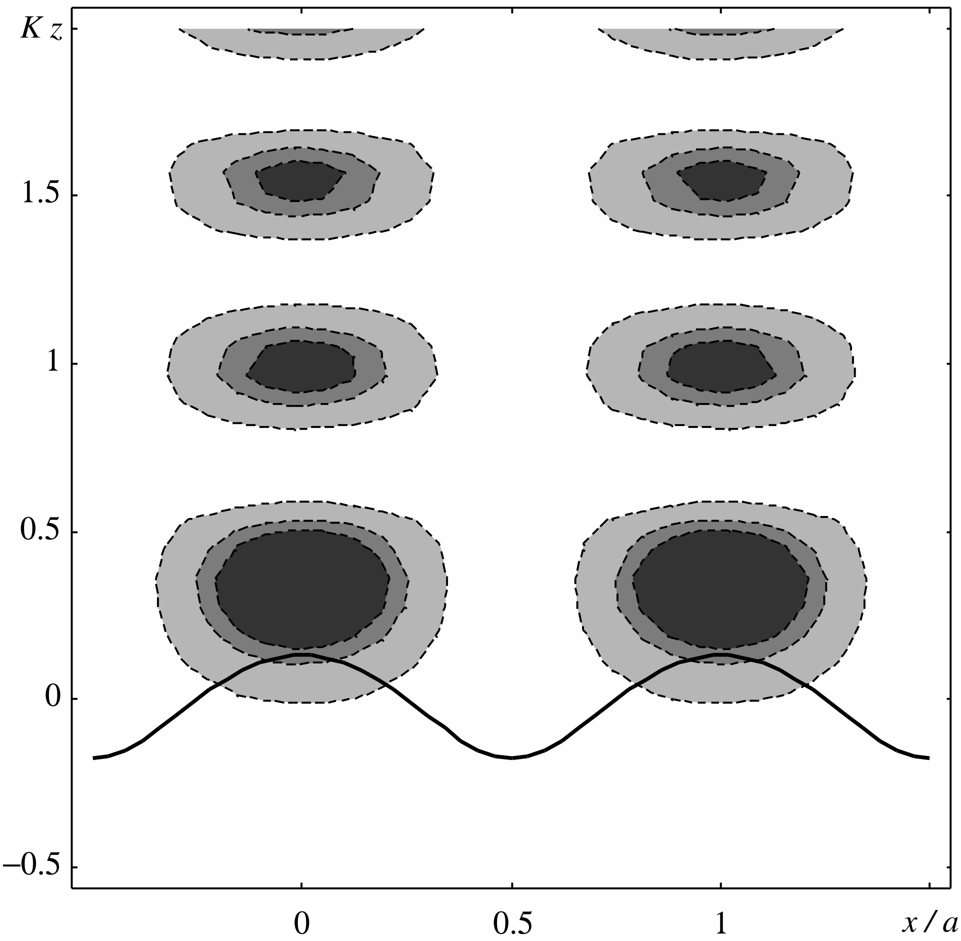

Figure 9.5: Lignes de niveaux pour la densité de probabilité de la fonction d'onde atomique $\psi_+(x,z)$ (9.18). La ligne ondulée représente une surface équipotentiel où le potentiel est égal à l'énergie cinétique incidente $(\hbar^2/2M)k_{zi}^2$. La densité de probabilité pour $\psi_-(x,z)$ présenterait des nœuds à $x = a/2$, qui seraient décalés plus profondément dans le réseau.
Paramètres : $\epsilon = 0.3,\ k_{zi} = 6\,\kappa$.

par un réseau épais dans une géométrie de BRAGG. Dans la description de cet effet, l'on décompose également l'onde dans le réseau en ondes partielles dont deux sont couplées entre elles de façon résonnante. En se restreignant à ces deux ondes, on trouve alors que leurs superpositions «symétrique» et «antisymétrique» (9.9) forment des ondes stationnaires dont ou bien les ventres ou bien les nœuds coïncident avec les centres diffuseurs du réseau. Ces ondes sont soumises à des potentiels d'interaction différents et se propagent donc dans la direction longitudinale avec des vecteurs d'ondes différents. A cause de cette différence, une onde stationnaire se forme également dans la direction longitudinale ; en la raccordant à la sortie du réseau aux ondes diffractées libres, l'on trouve que les intensités diffractées présentent un comportement oscillatoire en fonction de l'épaisseur du réseau.

Pour la diffraction d'atomes par l'onde évanescente stationnaire, nous observons que la dégénérescence des vecteurs d'onde longitudinaux des solutions $\eta_\pm(z)$ n'est pas levée parce que dans la région asymptotique loin du réseau, elles se raccordent par construction à des ondes planes dont le vecteur d'onde k_{zi} est fixé par l'onde incidente. Par contre, étant soumises à des potentiels moyens différents, elles sont déplacées spatialement l'une par rapport à l'autre [voir (9.13)], et leurs déphasages à la réflexion sont alors différents. De ce point de vue, nous pouvons interpréter les oscillations du «pendule» comme des interférences entre deux composantes («symétrique» et «antisymétrique») de l'onde atomique qui sont réfléchies par des points de rebroussement différents.[2]

Calcul avec la méthode du réseau de phase mince

Nous montrons maintenant que l'on obtient également le résultat approché (9.19) pour les populations diffractées par une généralisation de la méthode du réseau de phase mince. A cet effet, nous écrivons l'équation de SCHRÖDINGER pour les ondes partielles $\chi_{-1}(z)$ et $\chi_0(z)$ sous la forme

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + V_0(z) + \epsilon V_1(z)\right)\begin{pmatrix}\chi_{-1}(z)\\ \chi_0(z)\end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2M}k_{zi}^2\begin{pmatrix}\chi_{-1}(z)\\ \chi_0(z)\end{pmatrix} \tag{9.21}$$

où $V_0(z)$ est le potentiel exponentiel habituel, $V_0(z) = V_{\max}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}$. Le potentiel $V_1(z)$ a la forme d'une matrice et représente le couplage entre les ordres $n = 0$ et $n = -1$:

$$V_1(z) = \frac{\epsilon}{2}V_{\max}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}. \tag{9.22}$$

A la résonance de BRAGG, les trajectoires classiques dans le potentiel $V_0(z)$ sont identiques pour les ordres $n = 0$ et $n = -1$. Nous pouvons donc généraliser la formule

[2]Par conséquent, l'on peut s'attendre à ce que le potentiel de VAN DER WAALS modifie la différence des déphasages à la réflexion entre les composantes symétrique et anti-symétrique, et donc les oscillations (9.17) de la PENDELLÖSUNG.

du déphasage (8.45) pour obtenir l'effet cumulé de la matrice de couplage $V_1(z)$ au premier ordre en ϵ par l'expression suivante

$$\Delta\varphi = -\frac{1}{\hbar}\int \mathrm{d}t\, V_1\Big[z^{(0)}(t)\Big] \tag{9.23}$$

où la trajectoire classique $z^{(0)}(t)$ (6.5b) décrit le mouvement classique du «spineur» $(\chi_{-1}(z), \chi_0(z))^{\mathrm{T}}$ dans le potentiel non perturbé $V_0(z)$. L'intégrale (9.23) donne le résultat

$$\Delta\varphi = -\frac{\epsilon k_{zi}}{2\kappa}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{9.24}$$

Le déphasage $\Delta\varphi$ est donc également une matrice, et le facteur de phase $\exp \mathrm{i}\Delta\varphi$ est à interpréter comme une matrice carré qui agit sur le vecteur colonne $(0, 1)^{\mathrm{T}}$ des amplitudes incidentes. En utilisant les propriétés des matrices de PAULI, on trouve

$$\exp \mathrm{i}\Delta\varphi = \cos\left(\frac{\epsilon k_{zi}}{2\kappa}\right) - \mathrm{i}\sin\left(\frac{\epsilon k_{zi}}{2\kappa}\right)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{9.25}$$

et le vecteur colonne des amplitudes diffractées est donné par $(-\mathrm{i}\sin(\epsilon k_{zi}/2\kappa), \cos(\epsilon k_{zi}/2\kappa))^{\mathrm{T}}$. L'on obtient alors le résultat approché (9.19) pour les populations des ordres de diffraction.[3]

Ce résultat est un peu surprenant, car rappelons que dans le régime de BRAGG, d'un point de vue purement classique, l'atome oscille plusieurs fois dans les vallées du potentiel pendant sa réflexion, et ces oscillations créent de multiples caustiques dans la fonction d'onde atomique. Par conséquent, une description semi-classique de la diffraction dans le régime de BRAGG semble impossible. Pourtant, le présent calcul à l'aide de l'approximation du réseau de phase mince est possible parce que nous avons séparé les directions horizontale et verticale dans le mouvement de l'atome : le mouvement horizontal est en effet quantifié et décrit par le spineur $(\chi_{-1}(z), \chi_0(z))^{\mathrm{T}}$, et le mouvement vertical est déterminé par un potentiel matriciel. La trajectoire $z^{(0)}(t)$ n'est donc pas la composante verticale d'une trajectoire physique, c'est une quantité fictive pour décrire, de façon semi-classique, le mouvement vertical du spineur. Notons encore que cette approche est seulement faisable à la résonance de BRAGG, parce que les deux ondes partielles $\chi_0(z)$ et $\chi_{-1}(z)$ ont alors le même vecteur d'onde incident de sorte que nous pouvons leur associer une seule trajectoire semi-classique ; pour un angle d'incidence en dehors de la résonance de BRAGG, les vecteurs d'onde k_{zi} et $k_{z,-1}$ sont différents et le choix de la trajectoire fictive le long de laquelle nous calculons le déphasage matriciel, n'est pas univoque.

[3]En multipliant les amplitudes diffractées par le facteur de phase $-\exp \mathrm{i}\Delta\varphi_0$ dû à la réflexion par le potentiel $V_0(z)$ non perturbé, on retrouve également les amplitudes (9.16) si l'on se restreint au premier ordre en ϵ dans les déphasages $\Delta\varphi'_{\pm}(\epsilon)$.

9.2.3 Les populations des ordres faiblement couplés

Pour l'instant, nous nous sommes restreint aux ordres de diffraction fortement couplés $n = -1, 0$. Or, les populations de ces ordres diminuent à cause du couplage aux ordres $n = -2, +1$, et par conséquent, les oscillations de la *Pendellösung* sont atténuées lorsque le contraste ϵ augmente ou que le réseau devient plus épais. Nous évaluons ici cette diminution ; en supposant que les ondes partielles $\chi_{-2,1}(z)$ sont faiblement couplées aux ondes partielles $\chi_{-1,0}(z)$, nous pouvons alors nous servir d'une approche perturbative dans l'esprit de l'approximation de BORN. Nous présentons le calcul pour l'ordre $n = +1$, il s'effectue de façon analogue pour $n = -2$.

Les équations d'ondes couplées donnent l'équation suivante pour l'onde partielle $\chi_{+1}(z)$, en négligeant le couplage avec $\chi_{+2}(z)$:

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + k_{z,+1}^2 - U\mathrm{e}^{-2\kappa z}\right)\chi_{+1}(z) = \frac{\epsilon}{2}U\mathrm{e}^{-2\kappa z}\chi_0(z). \tag{9.26}$$

En remplaçant l'onde partielle $\chi_0(z)$ au deuxième membre de cette équation par la solution (9.14) que nous avons trouvée précédemment,

$$\chi_0(z) = \alpha_+\eta_+(z) + \alpha_-\eta_-(z), \tag{9.27}$$

nous avons en (9.26) une équation différentielle inhomogène à résoudre, comme c'était le cas à l'équation (7.27). Nous obtenons donc sa solution à l'aide d'une fonction de GREEN. En développant ensuite $\chi_{+1}(z)$ dans la région asymptotique $z \to +\infty$, nous trouvons le résultat suivant pour l'amplitude de diffraction a_{+1} :

$$a_{+1} = -\frac{\epsilon}{2k_{z,+1}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Delta\varphi(k_{z,+1})/2}\left\langle\phi_{k_{z,+1}}(z)\right| U\mathrm{e}^{-2\kappa z}\left|\chi_0(z)\right\rangle. \tag{9.28}$$

L'élément de matrice dans cette expression diffère de celui que nous avons rencontré dans l'approximation de BORN (7.35) parce qu'il fait intervenir les fonctions d'onde $\phi_{k_{z,+1}}(z)$ et $\eta_\pm(z)$ qui correspondent à des amplitudes U et $U'_\pm$ différentes du potentiel exponentiel [voir (9.11)]. Nous l'évaluons dans l'annexe 9.A.1 où nous montrons qu'il peut se mettre sous la forme [voir l'équation (9.A.9)]

$$\left\langle\phi_{k_{z,+1}}(z)\right| U\mathrm{e}^{-2\kappa z}\left|\eta_\pm(z)\right\rangle = \left\langle\phi_{k_{z,+1}}(z)\right| U\mathrm{e}^{-2\kappa z}\left|\phi_{k_{zi}}(z)\right\rangle \mathcal{F}(\epsilon), \tag{9.29}$$

où le facteur $\mathcal{F}(\epsilon)$ sans dimension est donné à l'équation (9.A.10). Il dépend des vecteurs d'onde réduits $k_{zi}/\kappa,\ k_{z,+1}/\kappa$, mais se réduit à l'unité pour $\epsilon = 0$.

Un exemple est présenté sur la figure 9.6 où nous avons tracé les populations pour les ordres de diffraction $n = -2, -1, 0, +1$. Nous constatons que les populations non résonnantes augmentent de façon monotone avec le contraste. Lorsqu'elles deviennent de l'ordre de l'unité (pour $\epsilon \approx 0.1$ environ), l'approche que nous avons suivie en nous restreignant d'abord aux ordres résonnants, n'est plus valable.

Pour en préciser davantage la validité, nous observons d'abord que l'élément de matrice (9.29) est proportionnel à celui que l'on obtient pour les fonctions d'ondes

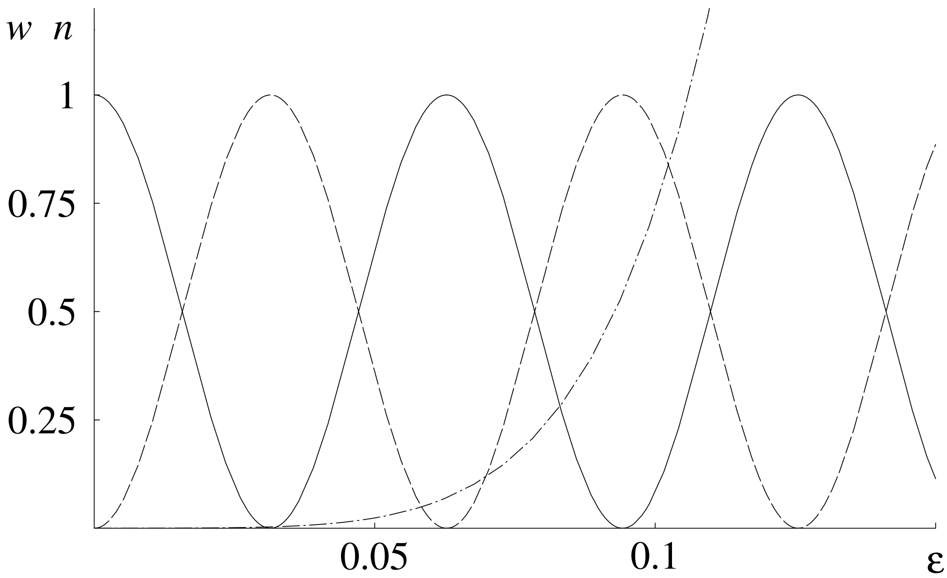

Figure 9.6: Populations des ordres $n = -1, 0, +1$ à la résonance de BRAGG *pour $n = -1$, en fonction du contraste ϵ du réseau. Trait plein : $n = 0$, tirets : $n = -1$, points-tirets : $n = +1$.*
Paramètres : $k_{zi} = 100\,\kappa$, $q = 10\,\kappa$, de sorte que $\Delta k_{z,-2} = \Delta k_{z,+1} \approx -4.1\,\kappa$. La population pour l'ordre $n = -2$ se confond avec celle de $n = +1$ à la précision de la figure.

$\phi_{k_{z,+1}}(z)$ et $\phi_{k_{zi}}(z)$ dans l'approximation de BORN [voir l'équation (7.33)]. Comme nous l'avons vu au paragraphe 7.3.3, le couplage vers l'ordre $n = +1$ est inefficace si la différence de vecteur d'onde $\Delta k_{z,+1} \equiv k_{z,+1} - k_{zi}$ est plus grande que la constante de décroissance κ du réseau de diffraction. C'est dans ce régime [qui s'exprime par la condition (9.2)] que la population w_{+1} est plus petite que w_{-1} à la limite perturbative.

Ensuite, le facteur $\mathcal{F}(\epsilon)$ dans (9.29) donne une correction par rapport au résultat de l'approximation de BORN. Cette correction diffère de l'unité pour un contraste non nulle parce que les fonctions d'onde $\eta_\pm(z)$ sont spatialement déplacées d'une distance $\simeq (1/2\kappa)\ln(1 \pm \epsilon/2)$ par rapport à $\phi_{k_{zi}}(z)$ [voir les amplitudes $U'_\pm$ (9.11)]. Dans l'annexe 9.A.2, nous montrons que ce déplacement peut augmenter considérablement la valeur de l'élément de matrice (9.29). En particulier, celui-ci passe par un maximum lorsque les points de rebroussement $z_{\text{reb}}^{(\eta_+)}$ et $z_{\text{reb}}^{(\phi)}$ pour les fonctions d'onde $\eta_+(z)$ et $\phi_{k_{z,+1}}(z)$ coïncident, de façon analogue à un facteur de FRANCK–CONDON. Cette situation correspond à un «contraste critique» ϵ_{cr} qui vaut

$$\begin{aligned} z_{\text{reb}}^{(\eta_+)} \equiv \frac{1}{2\kappa} \ln \frac{U(1+\epsilon/2)}{k_{zi}^2} &= z_{\text{reb}}^{(\phi)} \equiv \frac{1}{2\kappa} \ln \frac{U}{k_{z,+1}^2} \\ \Longrightarrow \quad \epsilon_{\text{cr}} = 2\left(\frac{k_{zi}^2}{k_{z,+1}^2} - 1\right) &\approx 4\frac{|\Delta k_{z,+1}|}{k_{zi}}. \end{aligned} \tag{9.30}$$

où nous avons supposé dans la dernière ligne que la différence de vecteur d'onde $\Delta k_{z,+1}$ est faible devant le vecteur d'onde incident k_{zi}. En estimant la valeur de l'élément de matrice (9.29) pour $\epsilon < \epsilon_{\text{cr}}$, nous obtenons dans l'annexe 9.A.2 une estimation pour la population w_{+1} [l'équation (9.A.13)]. La condition que celle-ci soit inférieure à l'unité donne alors la limite supérieure suivante pour le contraste ϵ :

$$\epsilon \ll \Delta\epsilon \frac{2}{\pi}\sqrt{\frac{|\Delta k_{z,+1}|}{\kappa}}, \tag{9.31}$$

où la période $\Delta\epsilon$ est donnée à (9.20). C'est donc dans le régime de BRAGG, $\Delta k_{z,+1} \gtrsim \kappa$, que la présente approche permet de décrire plusieurs périodes de la *Pendellösung*. Pour les paramètres de la figure 9.6, la limite (9.31) donne une valeur maximale $\epsilon \lesssim 1.3\,\Delta\epsilon$, ce qui est en accord avec les courbes tracées.

9.2.4 Domaine de validité du présent calcul

Nous avons visualisé le domaine de validité de notre description de la diffraction de BRAGG sur le schéma 9.7. Ce schéma reprend la représentation des différents régimes que nous avons introduite à la fin du chapitre 7 (la figure 7.20).

L'axe horizontal représente le transfert de vecteur d'onde vers l'ordre non résonnant $\Delta k_{z,+1}$. Le régime de BRAGG se trouve du côté droit de la ligne verticale où $\Delta k_{z,+1} = \kappa$. L'axe vertical correspond au contraste ϵ de l'onde évanescente stationnaire, avec une échelle caractéristique donnée par la période du «pendule» $\Delta\epsilon$ (9.20).

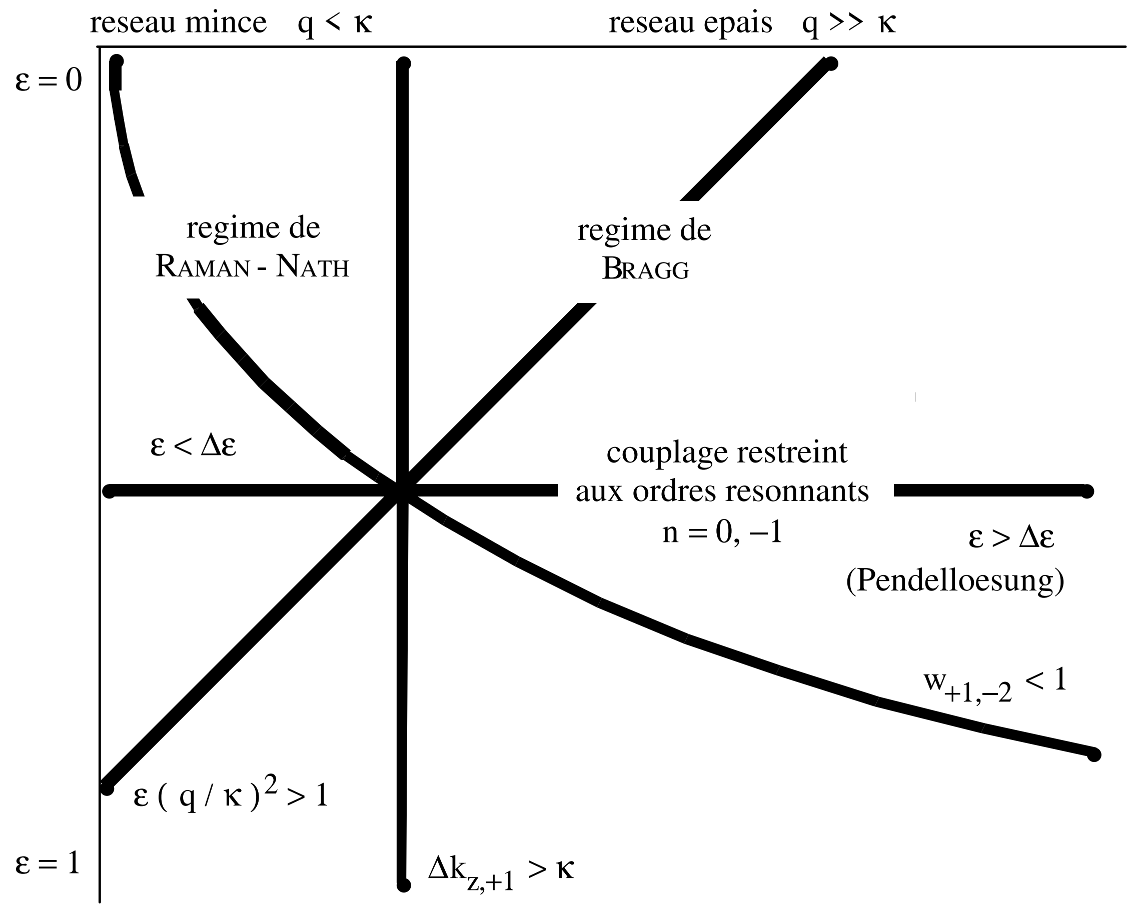

Figure 9.7: Représentation schématique de la validité de la présente approche à la diffraction de BRAGG. *Les courbes sont expliquées dans le texte.*

Le régime perturbatif où l'approximation de BORN est valable, se trouve au-dessus de la ligne horizontale $\epsilon = \Delta\epsilon$. La ligne courbe représente la limite (9.31) sur le contraste à partir de laquelle les populations non résonnantes deviennent non négligeables.

En somme, la solution approchée des équations d'ondes couplées nous a permis d'étendre les résultats de l'approximation de BORN au-delà du régime perturbatif, dans le domaine de paramètres délimité par le régime de BRAGG (la ligne verticale), d'une part, et la ligne courbe [la condition (9.31)], d'autre part.

9.3 Conclusion

La résonance de BRAGG apparaît lorsque deux ondes partielles ont le même vecteur d'onde normal. Elles sont alors couplées de façon résonnante par le réseau de diffraction. Dans le régime semiclassique, des faibles valeurs du contraste ϵ de l'onde évanescente stationnaire sont alors suffisantes pour créer une superposition à poids arbitraires entre l'onde atomique spéculaire et l'onde diffractée à résonance. Pour un contraste plus élevé, nous avons mis en évidence un transfert de population entre les deux ondes qui est approximativement périodique en fonction de ϵ. Ce phénomène est l'analogue de la « solution du pendule » (*Pendellösung*) dans la diffraction de la lumière ou des neutrons par un réseau épais. Pour la diffraction par l'onde évanescente stationnaire, nous avons également pu interpréter ce phénomène par l'interférence entre deux composantes « symétrique » et « antisymétrique » de l'onde atomique incidente, qui sont réfléchies à des positions différentes, avec des phases à la réflexion différentes.

Rappelons finalement que la diffraction de BRAGG peut être réalisée si l'onde évanescente stationnaire est suffisamment épaisse de sorte que la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement réduit le couplage vers les ordres non résonnants. Ce régime est caractérisé par la condition (9.2) qui exprime que les transferts de vecteur d'onde pour les ordres non résonnants sont plus grands que la constante de décroissance κ de l'onde évanescente. En fonction du contraste de l'onde évanescente stationnaire, il est alors possible d'observer quelques oscillations du « pendule » avant que celles-ci ne soient atténuées parce que les populations des ordres non résonnants deviennent trop importantes.

Annexe

9.A Eléments de matrice du potentiel exponentiel (II)

9.A.1 Calcul

Nous calculons dans cette annexe l'élément de matrice (9.28) qui détermine l'amplitude de diffraction pour l'ordre $n = +1$ de diffraction non résonnant (voir au paragraphe 9.2.3). Cet élément de matrice généralise (7.C.51) à des fonctions d'onde initiale et finale $\phi_{i,f}(z)$ qui correspondent à des amplitudes différentes U_i, U_f du potentiel exponentiel.

Nous considérons donc l'élément de matrice suivant

$$\langle \phi_f(z) | \, U \, \mathrm{e}^{-2\kappa z} \left| \phi_i(z) \right\rangle \tag{9.A.1}$$

où les fonctions d'onde sont données par

$$\phi_{i,f}(z) = \sqrt{\frac{k_{i,f}}{\pi\kappa} \sinh\left(\pi k_{i,f}/\kappa\right)} \, K_{\mathrm{i}k_{i,f}/\kappa}\left(u_{i,f}\,\mathrm{e}^{-\kappa z}\right), \tag{9.A.2}$$

avec $u_{i,f} = (U_{i,f}/\kappa^2)^{1/2}$. Dans le contexte de la diffraction de BRAGG, les valeurs de ces paramètres sont

$$\begin{array}{rclcrcl} k_f & = & k_{z,+1}, & \qquad & u_f & = & u_0, \\ k_i & = & k_{z,0}, & \qquad & u_i & = & u_0(1 \pm \epsilon/2)^{1/2}, \end{array} \tag{9.A.3}$$

où $u_0 = (U/\kappa^2)^{1/2}$.

En utilisant le même changement de variable que dans l'annexe 7.C, $z \mapsto u = u_0\,\mathrm{e}^{-\kappa z}$, l'élément de matrice (9.A.1) se ramène à

$$\begin{aligned} \langle \phi_f(z) | \, U \, \mathrm{e}^{-2\kappa z} \left| \phi_i(z) \right\rangle \; = \; & \frac{1}{\pi} \sqrt{k_f\, k_i \sinh\left(\pi k_f/\kappa\right) \, \sinh\left(\pi k_i/\kappa\right)} \times \\ & \times \mathcal{I}_2(k_f, k_i, u_f, u_i) \end{aligned} \tag{9.A.4}$$

avec

$$\mathcal{I}_2(k_f, k_i, u_f, u_i) \equiv \int_0^\infty \mathrm{d}u \, u \, K_{\mathrm{i}k_f/\kappa}[(u_f/u_0)\, u] \, K_{\mathrm{i}k_i/\kappa}[(u_i/u_0)\, u]. \tag{9.A.5}$$

Nous constatons d'abord que cette intégrale ne dépend plus que des paramètres réduits $\{k_f/\kappa,\ u_f/u_0,\ k_i/\kappa,\ u_i/u_0\}$. Dans les tables d'intégrales de GRADSHTEYN et RYZHIK[4], la solution pour l'intégrale (9.A.5) est donnée à l'équation 6.576.4. Nous trouvons alors le résultat :

$$\mathcal{I}_2(k_f, k_i, u_f, u_i) \;=\; \frac{u_0^2}{2u_f^2} \left(\frac{u_i}{u_f}\right)^{\mathrm{i}k_i/\kappa} \beta\!\left(\frac{k_f - k_i}{\kappa}\right) \, \beta\!\left(\frac{k_f + k_i}{\kappa}\right) \times \tag{9.A.6}$$

[4] I. S. GRADSHTEYN et I. M. RYZHIK, *Tables of Integrals, Series, and Products*, éd. A. JEFFREY.

$$\times\ {}_2F_1\left[1 - \mathrm{i}\frac{k_f - k_i}{2\kappa}, 1 + \mathrm{i}\frac{k_f + k_i}{2\kappa}\,; 2\,; 1 - \left(\frac{u_i}{u_f}\right)^2\right].$$

où nous avons utilisé la propriété suivante du facteur d'obliquité $\beta(\xi)$:

$$\beta(\xi) = \frac{\pi\xi/2}{\sinh(\pi\xi/2)} = \Gamma(1 + \mathrm{i}\xi/2)\Gamma(1 - \mathrm{i}\xi/2), \tag{9.A.7}$$

et où ${}_2F_1$ est la fonction hypergéométrique[5]

$${}_2F_1[\alpha_1, \alpha_2\,; \gamma\,; x] = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha_1)\,\Gamma(\alpha_2)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha_1 + n)\,\Gamma(\alpha_2 + n)}{\Gamma(\gamma + n)} \frac{x^n}{n!}. \tag{9.A.8}$$

L'expression (9.A.6) pour l'intégrale est valable sous la condition $\mathrm{Re}\,(u_f + u_i)/u_0 > 0$ qui est d'ailleurs vérifiée pour tous les cas qui nous intéressent.

Dans le cas particulier $u_f = u_i = u_0$, l'élément de matrice (9.A.1) se réduit à celui (7.C.51) que nous avons calculé à l'annexe 7.C. L'on vérifie en effet que dans ce cas, la fonction hypergéométrique dans (9.A.6) se réduit à l'unité, et nous obtenons le résultat (7.C.58).

Dans le cas général, nous constatons que l'élément de matrice est proportionnel à celui (7.C.58) où les fonctions d'onde initial et final correspondent au même potentiel exponentiel :

$$\begin{aligned} \langle\phi_f(z)|\,U\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}\left|\phi_i(z)\right\rangle &= \left\langle\phi_{k_f}(z)\right|U\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}\left|\phi_{k_i}(z)\right\rangle \times \\ &\times \frac{u_0^2}{u_f^2}\left(\frac{u_i}{u_f}\right)^{\mathrm{i}k_i/\kappa} {}_2F_1\left[1 - \mathrm{i}\frac{k_f - k_i}{2\kappa}, 1 + \mathrm{i}\frac{k_f + k_i}{2\kappa}\,; 2\,; 1 - \left(\frac{u_i}{u_f}\right)^2\right]. \end{aligned} \tag{9.A.9}$$

Pour les paramètres (9.A.3) de la diffraction de BRAGG, ceci implique que le facteur $\mathcal{F}(\epsilon)$ dans l'expression (9.29) est donné par la deuxième ligne de (9.A.9) :

$$\mathcal{F}(\epsilon) = \exp\left[\frac{\mathrm{i}k_{zi}}{2\kappa}\ln\left(1 \pm \frac{\epsilon}{2}\right)\right]\ {}_2F_1\left[1 - \mathrm{i}\frac{\Delta k_{z,+1}}{2\kappa}, 1 + \mathrm{i}\frac{k_{zi} + k_{z,+1}}{2\kappa}\,; 2\,; \mp\frac{\epsilon}{2}\right]. \tag{9.A.10}$$

Le développement en série (9.A.8) de la fonction hypergéométrique montre que nous avons $\mathcal{F}(\epsilon = 0) \equiv 1$.

9.A.2 Estimation

Nous estimons ici l'ordre de grandeur des éléments de matrice (9.29,9.A.9) qui donnent la population non résonnnante w_{+1}.

Rappelons d'abord que pour un contraste non nul, les fonctions d'onde $\eta_\pm(z)$ dans (9.29) sont déplacées par rapport à $\phi_{k_{zi}}(z)$ à cause des valeurs modifiées $U'_\pm$

[5] ABRAMOWITZ et STEGUN, *op. cit.*, chap. 15.

(9.11) du potentiel exponentiel auquel elles sont soumises. Plus précisément, lorsque le contraste augmente, la fonction d'onde $\eta_+(z)$ est soumise à un potentiel plus élevé de sorte que son point de rebroussement se rapproche de celui de $\phi_{k_{z,+1}}(z)$, qui correspond à une vitesse incidente moins élevée. Inversement, le point de rebroussement de $\eta_-(z)$ s'éloigne de celui de $\phi_{k_{z,+1}}(z)$. Le contraste critique $\epsilon_{\rm cr}$ défini à l'équation (9.30) correspond à la situation où les points de rebroussement pour $\eta_+(z)$ et $\phi_{k_{z,+1}}(z)$ coïncident à la position $\bar{z}_{\rm reb}$.

Pour estimer dans ce cas l'élément de matrice, nous nous plaçons dans le régime semi-classique, $k_{zi}, k_{z,+1} \gg \kappa$, et supposons également $k_{zi} \gg |\Delta k_{z,+1}|$. En notant que les fonctions d'onde décroissent rapidement dans la région classiquement interdite $z < \bar{z}_{\rm reb}$, et qu'elles sont d'amplitude unité dans la région asymptotique, nous allons prendre en compte seulement la région $z > \bar{z}_{\rm reb}$ et approximer le produit $\phi^*_{k_{z,+1}}(z)\,\eta_+(z)$ des fonctions d'onde par une constante numérique B de l'ordre de l'unité.

Par la définition même du point de rebroussement, le potentiel $U\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}$ y prend la valeur $k^2_{z,+1}$. L'intégrale sur l'exponentielle décroissante donne alors l'estimation suivante

$$\epsilon = \epsilon_{\rm cr} \ : \quad \left|\left\langle \phi_{k_{z,+1}}(z) \right| U\mathrm{e}^{-2\kappa z} \left| \eta_+(z) \right\rangle\right| \simeq \frac{B k^2_{z,+1}}{2\kappa}. \qquad (9.A.11)$$

Dans quelques cas particuliers, nous disposons d'expressions exactes de l'élément de matrice (9.A.11) : pour $\epsilon = 0$, nous retrouvons l'élément de matrice habituel (avec des points de rebroussement différents), et le résultat (7.38) donne alors $B \simeq \beta(\Delta k_{z,+1}/\kappa)$; d'autre part, si nous remplaçons $\eta_+(z)$ par $\phi_{k_{z,+1}}(z)$, les points de rebroussement coïncident et la différence des vecteurs d'onde s'annulle ; en utilisant encore le résultat (7.38), nous trouvons $B = 1$. De façon générale, pour $\Delta k_{z,+1} \neq 0$, le produit $\phi^*_{k_{z,+1}}(z)\,\eta_+(z)$ des fonctions d'onde est une fonction oscillante de z qui présente des battements à la période $1/|\Delta k_{z,+1}|$; l'intégrale sur z est donc réduite par rapport à $\Delta k_{z,+1} = 0$, et nous avons $B < 1$.

Sur la figure 9.8, nous représentons les valeurs absolues des éléments de matrice (9.29) en fonction du contraste ϵ. Nous constatons en effet que le recouvrement avec $\eta_+(z)$ passe par un maximum au voisinage du contraste critique, qui vaut $\epsilon \approx 0.17$ pour les paramètres choisis. La valeur maximale de l'élément de matrice donne $B \approx 0.8$ en comparant à l'estimation (9.A.11).

Pour estimer la valeur de l'élément de matrice (9.29) dans la région $\epsilon < \epsilon_{\rm cr}$, nous allons utiliser l'approximation linéaire suivante

$$\left|\left\langle \phi_{k_{z,+1}}(z) \right| U\mathrm{e}^{-2\kappa z} \left| \eta_+(z) \right\rangle\right| \lesssim \frac{\epsilon}{\epsilon_{\rm cr}} \frac{k^2_{z,+1}}{2\kappa}, \qquad (9.A.12)$$

où nous avons pris la limite supérieure $B = 1$ pour le coefficient B dans (9.A.11). L'approximation (9.A.12) est représentée par la ligne droite en pointillées sur la figure 9.8, et nous constatons qu'elle est une surestimation satisfaisante de la valeur exacte de l'élément de matrice. C'est seulement pour un contraste assez petit que la valeur exacte dépasse l'estimation (9.A.12) : en comparant à la valeur exacte non

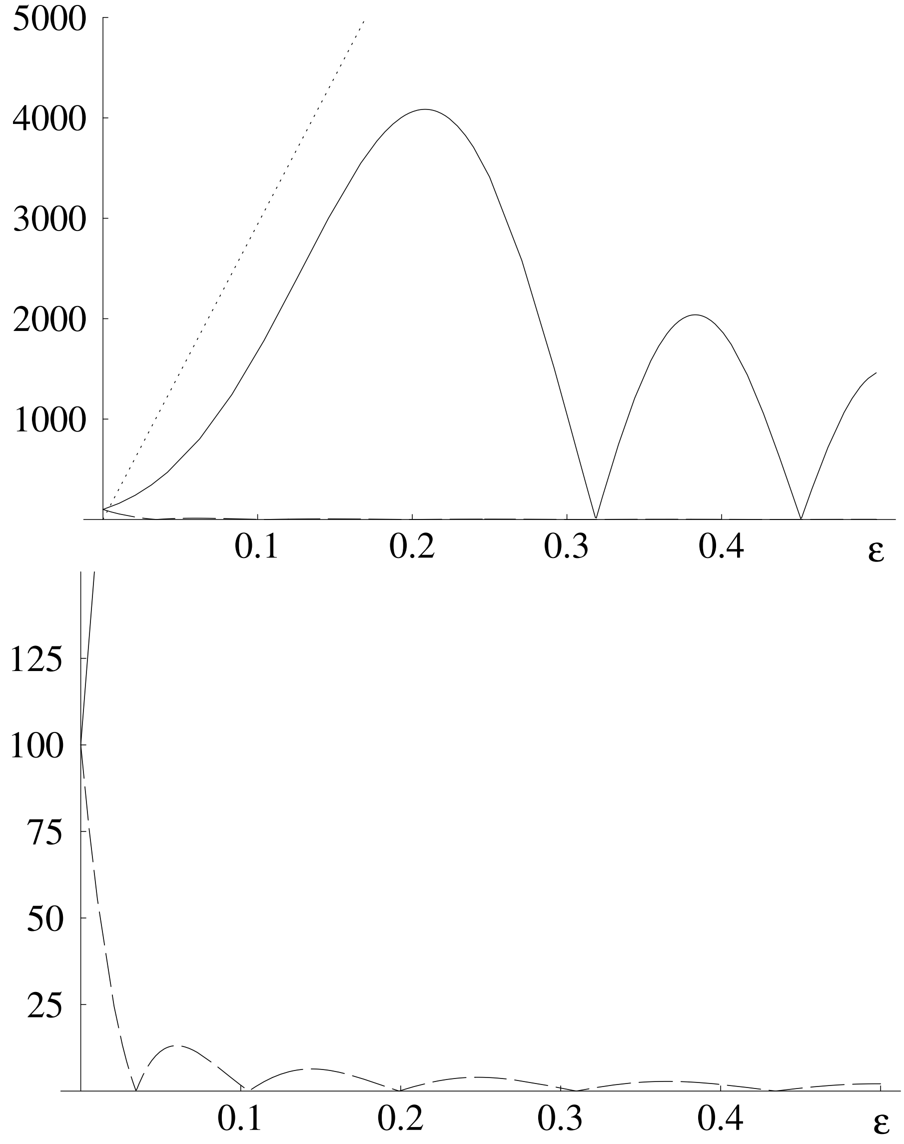

Figure 9.8: Valeur absolue des éléments de matrice (9.29), en fonction du contraste ϵ. Trait plein : recouvrement avec $\eta_+(z)$, tirets : recouvrement avec $\eta_-(z)$, pointillées : surestimation linéaire (9.A.12) pour le recouvrement avec $\eta_+(z)$. Les éléments de matrice oscillent en fonction du contraste lorsque les ventres et nœuds des ondes atomiques stationnaires $\eta_\pm(z)$ passent par le point de rebroussement de la fonction d'onde $\phi_{k_z,+1}(z)$.
Paramètres identiques à la figure 9.6 ($k_{zi} = 100\,\kappa$, $\Delta k_{z,+1} \approx -4.1\,\kappa$). L'estimation (9.30) pour le contraste critique vaut $\epsilon_{\rm cr} \approx 0.17$.

nulle de l'élément de matrice pour $\epsilon = 0$, nous trouvons que (9.A.12) est valable pour $\epsilon > \epsilon_{\rm cr}\beta(\Delta k_{z,+1}/\kappa)$.

A partir de (9.A.12) et (9.28), nous trouvons maintenant l'estimation suivante pour la population w_{+1} :

$$w_{+1} \lesssim \left(\frac{\epsilon^2 k_{z,+1}}{4\epsilon_{\rm cr}\kappa}\right)^2. \tag{9.A.13}$$

En imposant qu'elle soit inférieure à l'unité, nous trouvons une limite supérieure pour le contraste en dessous de laquelle il est légitime de négliger le couplage aux ordres non résonnants[6]

$$\epsilon \ll 2\sqrt{\epsilon_{\rm cr}\frac{\kappa}{k_{z,+1}}}. \tag{9.A.14}$$

En utilisant les expressions (9.20, 9.30) pour la période $\Delta\epsilon$ et le contraste critique $\epsilon_{\rm cr}$, la limite (9.A.14) peut s'écrire

$$\epsilon \ll \Delta\epsilon\frac{2}{\pi}\sqrt{\frac{|\Delta k_{z,+1}|}{\kappa}}, \tag{9.A.15}$$

ce qui démontre la condition (9.31).

[6]Pour que cette condition soit compatible avec la condition de validité $\epsilon > \epsilon_{\rm cr}\beta(\Delta k_{z,+1}/\kappa)$ de l'estimation linéaire (9.A.12), il faut satisfaire l'inégalité

$$\sqrt{|\Delta k_{z,+1}|/\kappa}\,\beta(\Delta k_{z,+1}/\kappa) \ll 1.$$

Or, la valeur maximale de la fonction de $|\Delta k_{z,+1}|$ au membre gauche est ≈ 0.69 (atteinte pour $|\Delta k_{z,+1}| \approx 0.82\,\kappa$). Cette inégalité est donc toujours satisfaite, quelle que soit la valeur du transfert de vecteur d'onde.

Chapitre 10

La diffraction d'atomes dans le régime quantique

Introduction

Nous nous plaçons maintenant dans le régime quantique de la diffraction d'atomes par l'onde évanescente stationnaire. Nous supposons donc que les atomes incidents ont une vitesse tellement faible que leur longueur d'onde de DE BROGLIE est beaucoup plus grande que la longueur de décroissance de l'onde évanescente. Rappelons que pour le cas de la réflexion spéculaire, nous avons constaté au chapitre 3 que dans le régime quantique, le potentiel dipolaire de l'onde évanescente peut être assimilé à une barrière de potentiel infinie. Cette observation a été confirmée au paragraphe 7.4, où nous avons montré que la diffraction d'atomes par l'onde évanescente stationnaire dans les limites quantique et perturbative est équivalente à la diffraction par une barrière de potentiel infinie dont la position est spatialement modulée, avec une modulation sinusoïdale d'amplitude faible devant la longueur d'onde incidente. En optique lumineuse, un problème analogue se présente pour la diffraction par un réseau métallique, et dans ce contexte, la théorie dynamique de la diffraction a été étudiée par Lord RAYLEIGH en 1907 (« *On the dynamical theory of gratings* »[1]). Nous nous servons maintenant de son approche pour calculer la figure de diffraction des atomes. A la différence du paragraphe 7.4, nous ne nous limitons pas au premier ordre par rapport au contraste, et nous verrons que l'approche de RAYLEIGH permet alors de calculer les populations des ordres de diffraction supérieurs $n = \pm 2, \pm 3, \ldots$

[1] *Proc. Roy. Soc. (London) Ser. A* **79**, 399.

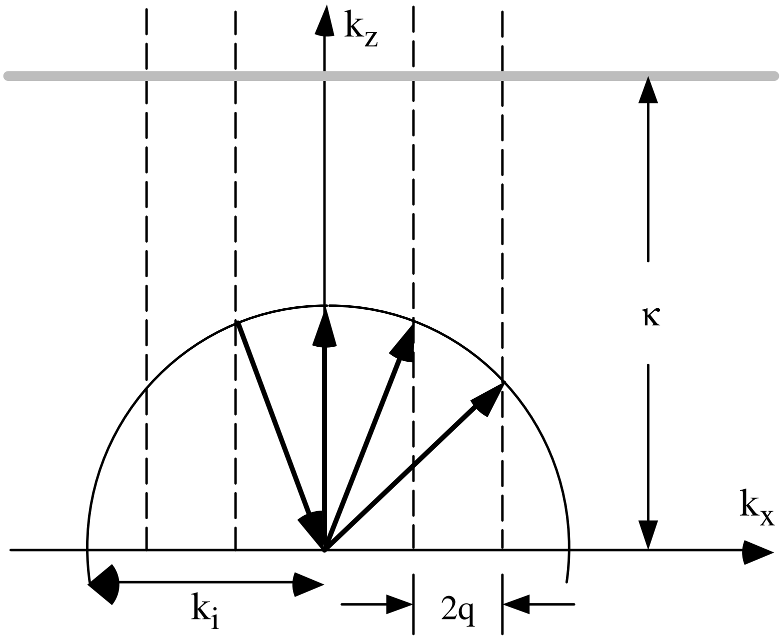

*Figure 10.1: Construction d'*EWALD *pour les vecteurs d'onde diffractés dans le régime quantique.*

10.1 Rappels : caractérisation du régime quantique

Le régime quantique de la diffraction d'atomes s'exprime par la condition suivante pour les composantes normales des vecteurs d'onde incident et diffractés

$$k_{zi}, k_{zn} \ll \kappa. \tag{10.1}$$

Cette condition implique en particulier que le vecteur d'onde horizontal q de l'onde évanescente doit être beaucoup plus petit que sa constante de décroissance κ,

$$q \ll \kappa, \tag{10.2}$$

pour que les transferts de vecteur d'onde à la diffraction soient permis par la conservation d'énergie (voir le diagramme d'EWALD sur la figure 10.1). Pour une réalisation expérimentale possible du régime quantique, nous renvoyons le lecteur au paragraphe 7.4.2.

Nous allons supposer que dans le régime quantique, l'onde évanescente stationnaire est équivalente à une barrière de potentiel infinie qui se trouve à la position

$$\zeta_{\text{eff}}^{\text{Schr}}(x) = \zeta_{\text{eff}}^{\text{Schr}} + \frac{1}{2\kappa} \ln(1 + \epsilon \cos 2qx)\,. \tag{10.3}$$

Dans cette expression, $\zeta_{\text{eff}}^{\text{Schr}}$ est la position du miroir effectif pour la réflexion spéculaire par une onde évanescente simple que nous avons calculée à l'équation (3.5).

Comme aux chapitres précédents, nous nous plaçons dans le plan xOz du réseau, en omettant le mouvement libre de l'atome dans la direction Oy.

10.2 L'approche de RAYLEIGH

Nous présentons maintenant l'approche de RAYLEIGH qui permet de calculer la fonction d'onde diffractée par la barrière de potentiel infinie située sur la surface ondulée $\zeta_{\text{eff}}^{\text{Schr}}(x)$.

La fonction d'onde est déterminée par deux conditions :

1. elle doit s'annuler sur la surface du réseau

$$\psi\Big[x, \zeta_{\text{eff}}^{\text{Schr}}(x)\Big] = 0, \tag{10.4}$$

2. et dans l'espace $z > \zeta_{\text{eff}}^{\text{Schr}}(x)$ au-dessus du réseau, elle doit satisfaire à l'équation de SCHRÖDINGER libre pour l'énergie E_i

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,z) = E_i\,\psi(x,z). \tag{10.5}$$

   Cette énergie est fixée par :

$$E_i = \frac{\hbar^2}{2M}\left(k_{xi}^2 + k_{xi}^2\right), \tag{10.6}$$

   où $(k_{xi}, -k_{zi})$ est le vecteur d'onde incident.

Nous cherchons à calculer les amplitudes de diffraction a_n qui sont définies par le développement (7.12) de la fonction d'onde

$$z \to +\infty \ : \quad \psi(x,z) = \exp \mathrm{i}\left(k_{xi}x - k_{zi}z\right) + \sum_n a_n \exp \mathrm{i}(k_{xn}x + k_{zn}z) \tag{10.7}$$

dans la région asymptotique loin du réseau. Dans cette expression, les vecteurs d'onde diffractés (k_{xn}, k_{zn}) sont donnés par les expressions habituelles (7.4, 7.5).

L'approche de RAYLEIGH consiste à supposer que le développement asymptotique (10.7) décrive la fonction d'onde dans tout l'espace au-dessus du réseau, $z \geq \zeta_{\text{eff}}^{\text{Schr}}(x)$. Notons que cet *Ansatz* est exact dans la région au-dessus de la hauteur maximale du réseau, $z > \max \zeta_{\text{eff}}^{\text{Schr}}(x)$ (voir la figure 10.2), mais que l'on néglige dans la région hachurée sur la figure, $\zeta_{\text{eff}}^{\text{Schr}}(x) < z < \max \zeta_{\text{eff}}^{\text{Schr}}(x)$, des ondes diffusées qui se propageraient dans la direction du réseau avec un vecteur d'onde différent du vecteur d'onde incident. Cette approximation est habituellement appelée l'hypothèse de RAYLEIGH[2], et nous en évoquerons les conditions de validité au paragraphe 10.3.3.

[2] M. NIETO-VESPERINAS, *Scattering and Diffraction in Physical Optics*, chap. 7.7.

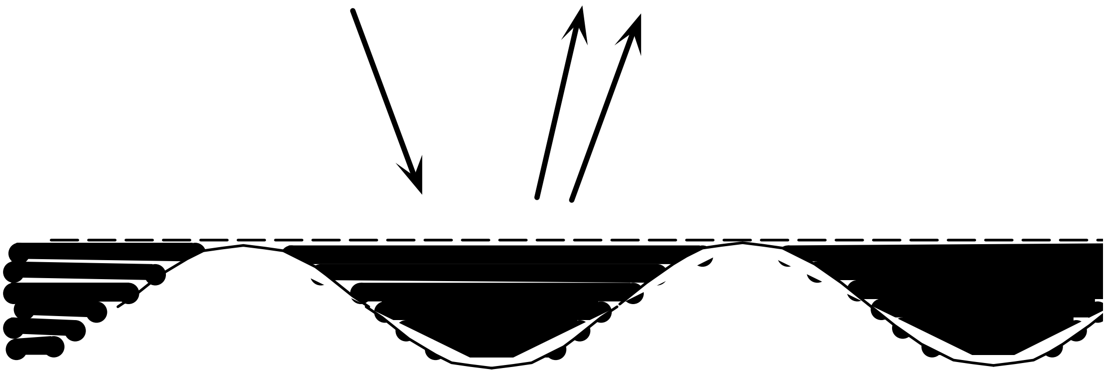

Figure 10.2: Illustration de l'hypothèse de RAYLEIGH *: l'on suppose que dans la région hachurée, la fonction d'onde est donnée par le développement (10.7).*

Il convient de prendre la position du miroir effectif non modulé $\zeta_{\text{eff}}^{\text{Schr}}$ comme référence de phase pour les amplitudes de diffraction

$$a_n = \tilde{a}_n \exp\left[\mathrm{i}\,(k_{zn} + k_{zi})\,\zeta_{\text{eff}}^{\text{Schr}}\right]. \tag{10.8}$$

La condition aux limites (10.4) donne alors l'équation suivante pour les amplitudes $\tilde{a}_n$

$$1 + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \tilde{a}_n\, \mathrm{e}^{2\mathrm{i}nqx} \exp\left[\mathrm{i}\,(k_{zn} + k_{zi})\,\delta\zeta(x)\right] = 0, \tag{10.9}$$

où $\delta\zeta(x)$ est la partie modulée de la surface du réseau (10.3) :

$$\delta\zeta(x) = \frac{1}{2\kappa} \ln(1 + \epsilon \cos 2qx)\,. \tag{10.10}$$

10.3 La figure de diffraction

10.3.1 Calcul perturbatif des amplitudes de diffraction

Afin de résoudre l'équation (10.9) pour les amplitudes de diffraction, nous allons utiliser un développement perturbatif. A cet effet, nous tirons profit du fait que dans le régime quantique (10.1), l'amplitude de modulation du miroir effectif (10.10) est de l'ordre de $1/\kappa$ et donc beaucoup plus petite que la longueur d'onde incidente $2\pi/k_i$. Nous résolvons donc les équations (10.9) de façon perturbative, en puissances ascendantes du paramètre $k_{zi}\delta\zeta(x)$. En développant les amplitudes de diffraction $\tilde{a}_n$ jusqu'au deuxième ordre inclus et en séparant les différents ordres, nous obtenons

$$1 + \sum_n \tilde{a}_n^{(0)}\, \mathrm{e}^{2\mathrm{i}nqx} \quad = \quad 0, \tag{10.11a}$$

$$\sum_n \left[\tilde{a}_n^{(1)} + \mathrm{i}\,(k_{zn} + k_{zi})\,\delta\zeta(x)\,\tilde{a}_n^{(0)}\right] \mathrm{e}^{2inqx} \;=\; 0, \tag{10.11b}$$

$$\sum_n \left[\tilde{a}_n^{(2)} + \mathrm{i}\,(k_{zn} + k_{zi})\,\delta\zeta(x)\,\tilde{a}_n^{(1)} \right.$$
$$\left. -\tfrac{1}{2}(k_{zn} + k_{zi})^2 \delta\zeta^2(x)\,\tilde{a}_n^{(0)}\right] \mathrm{e}^{2inqx} \;=\; 0, \tag{10.11c}$$

où les exposants $(0), (1), (2)$ notent l'ordre dans le développement. Ces équations sont résolues par une transformation de FOURIER[3], et l'on trouve alors les amplitudes de diffraction suivantes [133]

$$\tilde{a}_n^{(0)} \;=\; -\delta_{n,0}, \tag{10.12a}$$
$$\tilde{a}_n^{(1)} \;=\; 2\mathrm{i}k_{zi}\,[\delta\zeta]_n\,, \tag{10.12b}$$
$$\tilde{a}_n^{(2)} \;=\; 2k_{zi} \sum_m k_{zm}\,[\delta\zeta]_{n-m}^*\,[\delta\zeta]_m\,, \tag{10.12c}$$

où les $[\delta\zeta]_n$ sont les composantes de Fourier de la modulation du réseau ($a = \pi/q$ est la période du réseau) :

$$[\delta\zeta]_n \equiv \int_0^a \frac{\mathrm{d}x}{a}\,\delta\zeta(x)\,\mathrm{e}^{-2inqx}. \tag{10.13}$$

Les amplitudes de diffraction au premier ordre (10.12b) sont donc proportionnelles aux coefficients de FOURIER du miroir effectif.

10.3.2 Etude de la figure de diffraction

Sur la figure 10.3, nous représentons les populations $w_n \equiv (\mathrm{Re}\,k_{zn}/k_{zi})|\tilde{a}_n|^2$ des ordres de diffraction, pour des valeurs différentes du contraste ϵ. Nous avons utilisé les amplitudes (10.12) jusqu'au premier ordre en $\delta\zeta$ pour les ordres non spéculaires, et jusqu'au deuxième ordre pour l'ordre $n = 0$.

Nous constatons qu'à la limite d'un contraste faible, seuls les ordres non spéculaires $n = \pm 1$ ont une population notable dans la figure de diffraction. En effet, dans cette limite, la surface du réseau présente une modulation (10.10) sinusoïdale

$$\epsilon \ll 1\ : \quad \delta\zeta(x) \approx \frac{\epsilon}{2\kappa} \cos 2qx, \tag{10.14}$$

et nous retrouvons alors les résultats du régime perturbatif (7.76), avec les populations suivantes pour les ordres $n = \pm 1$:

$$w_{\pm 1} \approx \frac{\epsilon^2}{4} \frac{k_{zi} k_{z,\pm 1}}{\kappa^2}. \tag{10.15}$$

[3]Pour obtenir l'équation du second ordre (10.12c), nous utilisons l'identité de PARSEVAL

$$\int_0^a \frac{\mathrm{d}x}{a} \delta\zeta^2(x) = \sum_n |[\delta\zeta]_n|^2\,.$$

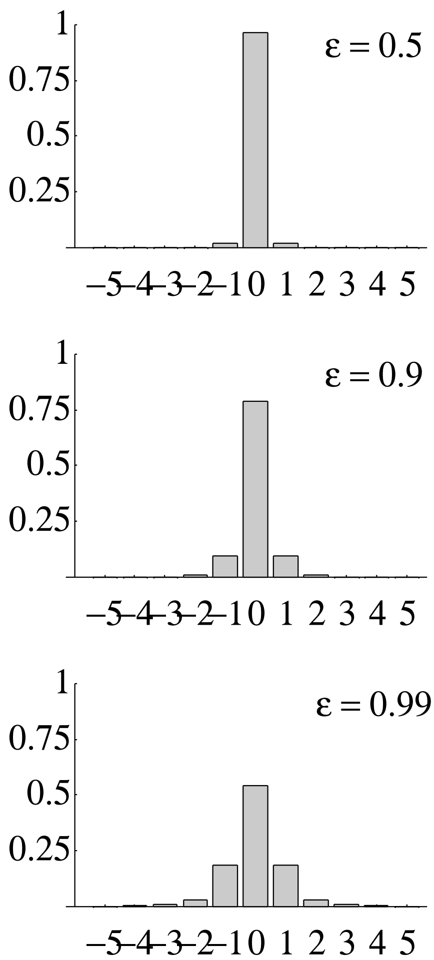

Figure 10.3: Populations des ordres de diffraction dans le régime quantique, calculées à partir des amplitudes (10.12) jusqu'au premier ordre en $\delta\zeta$ pour les ordres non spéculaires $n \neq 0$ et jusqu'au deuxième pour $n = 0$.
Du haut vers le bas : contraste $\epsilon = 0.5,\ 0.9,\ 0.99$. Incidence normale, avec un vecteur d'onde incident $k_{zi} = 0.5\,\kappa$ et $q = 0.05\,\kappa$.

Pour les paramètres de la figure 10.3 ($k_{zi} = 0.5\,\kappa$), cette situation est réalisée même pour un contraste $\epsilon = 0.5$.

Lorsque le contraste augmente, la surface du réseau acquiert des harmoniques supérieures

$$\delta\zeta(x) \approx \frac{\epsilon}{2\kappa}\cos 2qx + \frac{\epsilon^2}{4\kappa}\cos^2 2qx + \frac{\epsilon^3}{6\kappa}\cos^3 2qx + \ldots \tag{10.16}$$

et des ordres plus élevés apparaissent dans la figure de diffraction (voir les cas $\epsilon = 0.9$ et $\epsilon = 0.99$ sur la figure 10.3).

La population de l'ordre spéculaire

Nous notons qu'au premier ordre en $\delta\zeta$, l'amplitude de l'ordre spéculaire a la forme d'un facteur de phase [en utilisant (10.12a, 10.12b)]

$$\tilde{a}_0^{(0)} + \tilde{a}_0^{(1)} = -1 + 2\mathrm{i}k_{zi}\left[\delta\zeta\right]_0 \approx \exp\mathrm{i}\left(\pi - 2k_{zi}\left[\delta\zeta\right]_0\right) \tag{10.17}$$

où le déphasage constant π correspond à la réflexion sur le miroir effectif non modulé à la position $\zeta_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{Schr}}$. La phase au premier ordre $-2k_{zi}\left[\delta\zeta\right]_0$ correspond au déplacement de la surface du réseau par rapport à la position non modulée, moyenné sur une période.[4] Nous constatons donc que la population de l'ordre spéculaire est inchangée au premier ordre du développement perturbatif. C'est à l'ordre quadratique que l'on trouve la diminution de la population spéculaire, avec le résultat [133]

$$\begin{aligned} w_0 &= \left|\tilde{a}_0^{(0)} + \tilde{a}_0^{(1)} + \tilde{a}_0^{(2)}\right|^2 \\ &= 1 - 4k_{zi}\sum_n \mathrm{Re}\,k_{zn}\left|\left[\delta\zeta\right]_n\right|^2. \end{aligned} \tag{10.18}$$

A partir de cette expression, l'on vérifie aisément que les populations des ordres de diffraction s'additionnent à l'unité, à l'ordre quadratique en $\delta\zeta$ inclus.

10.3.3 Validité de l'approche de Rayleigh

Rappelons que le *Ansatz* (10.7) de la méthode de Rayleigh néglige la possibilité que l'onde incidente soit déviée avant d'être réfléchie par le réseau. Une telle situation est représentée sur la figure 10.4. L'approche de Rayleigh est alors limitée à des réseaux qui ne sont pas trop profondément modulés. Le problème d'un critère de validité plus précis a été étudié plusieurs fois dans la littérature, et nous renvoyons à ce sujet au chapitre 7.7 du livre de Nieto–Vesperinas [82]. Pour un réseau avec une modulation sinusoïdale, un critère généralement admis est que son amplitude de modulation

[4]Notons qu'au premier ordre en ϵ, la modulation du réseau est sinusoïdale (10.14), et ce déplacement moyen s'annule.

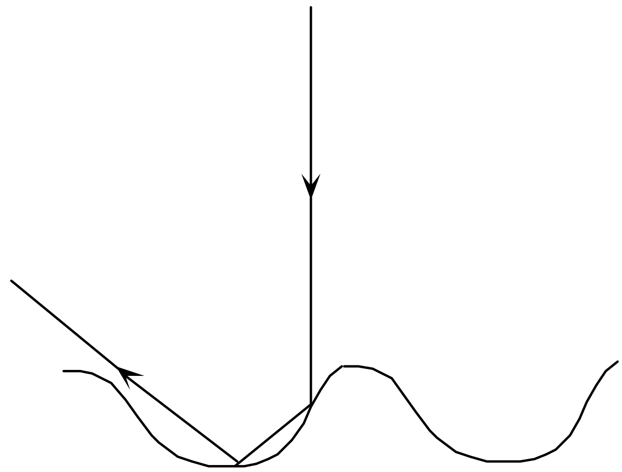

Figure 10.4: Trajectoire classique au-dessus d'un réseau présentant une forte ondulation.

soit petite devant la période. En appliquant ce critère pour notre réseau $\zeta_{\text{eff}}^{\text{Schr}}(x)$ (10.3) (bien que sa modulation ne soit pas sinusoïdale), nous trouvons la condition

$$\frac{1}{2\pi}\left|\ln\left(1-\epsilon\right)\right|\frac{q}{\kappa} \ll 1 \tag{10.19}$$

Comme nous avons $q \ll \kappa$ (10.2) dans le régime quantique, l'inégalité (10.19) est satisfaite même pour un contraste assez proche de la valeur maximale $\epsilon = 1$, parce que la divergence du logarithme $|\ln(1-\epsilon)|$ dans la limite $\epsilon \to 1$ est très faible.

Sur le schéma 10.5 qui reprend la représentation de la figure 7.20, la condition (10.19) correspond à la ligne courbe dans la région $\epsilon \lesssim 1$. D'une part, l'approche de RAYLEIGH nous a donc permis d'étendre les résultats de l'approximation de BORN sur un grand intervalle de contrastes. D'autre part, elle reste limitée à de faibles valeurs du vecteur d'onde q ; cependant, cette limitation est d'ordre plus fondamental parce qu'elle est la conséquence de la conservation d'énergie.

10.4 Conclusion

Dans la limite quantique, nous pouvons décrire l'onde évanescente stationnaire comme une barrière de potentiel infinie qui est modulée spatialement. La diffraction de l'onde atomique par cette barrière ressemble alors à la diffraction de la lumière par un réseau métallique. Pour calculer les amplitudes de diffraction, nous nous sommes servi de l'approximation de RAYLEIGH où l'on suppose que le développement asymptotique de la fonction d'onde la décrit également au voisinage de la surface du réseau. Nous avons effectué un développement perturbatif en utilisant le fait que dans le régime quantique, le profil du réseau présente des variations $\delta\zeta(x)$ beaucoup plus petites que la longueur d'onde atomique incidente. Au premier ordre en $\delta\zeta(x)$, les amplitudes

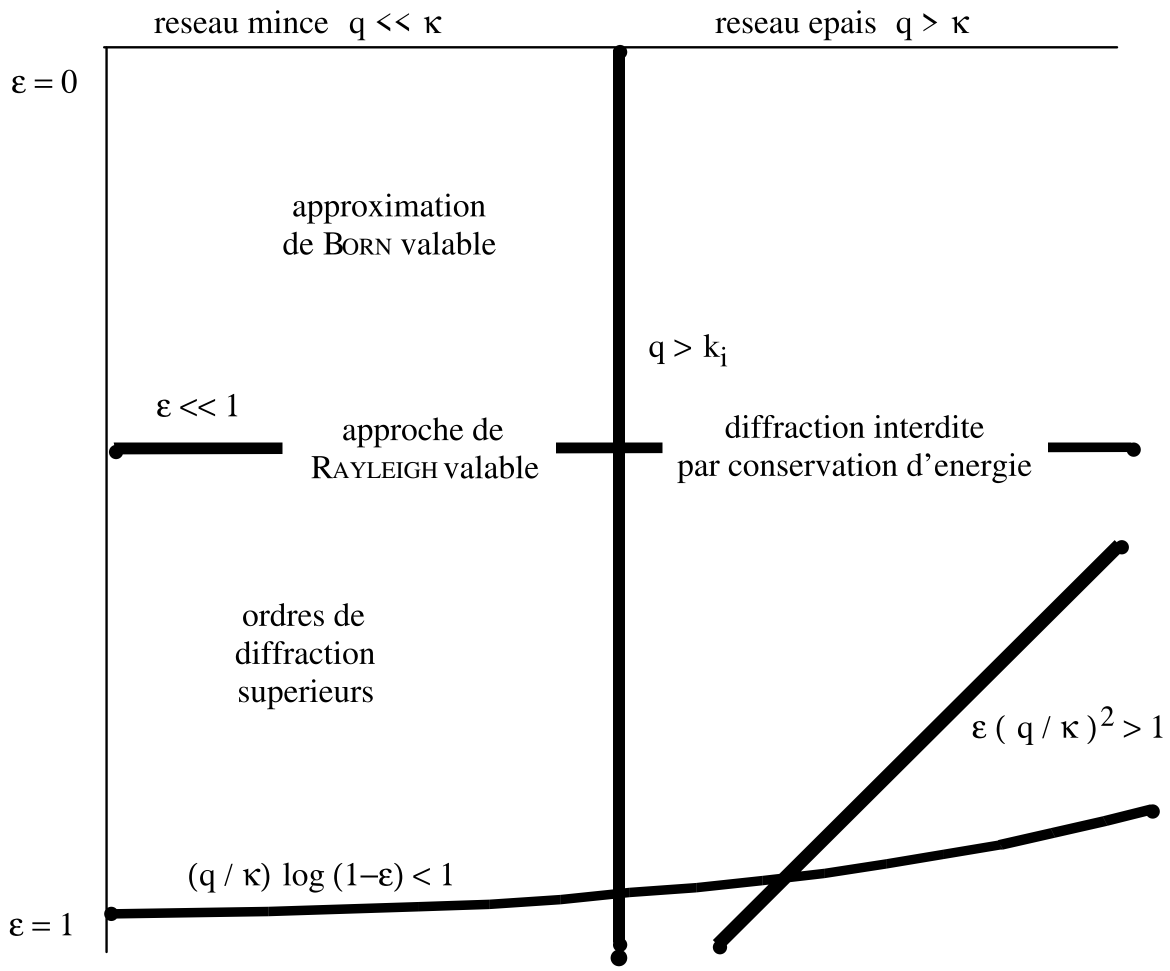

Figure 10.5: Représentation schématique de la domaine de validité de l'approximation de BORN *et de la méthode de* RAYLEIGH.
Partie supérieure : limite perturbative $\epsilon \ll 1$, *approximation de* BORN *valable. Partie inférieure :* $\epsilon \lesssim 1$, *des ordres supérieures apparaissent dans la figure de diffraction. Partie gauche :* $q < k_i$, *diffraction permise par la conservation de l'énergie. Partie droite : diffraction interdite [toutes les ondes diffractées avec* $n \neq 0$ *dans le développement (10.7) sont alors évanescentes].*

de diffraction sont alors proportionnelles aux composantes de FOURIER du profil, et l'on retrouve les résultats de l'approximation de BORN dans la limite d'un contraste faible. Par contre, la méthode de RAYLEIGH permet aussi de couvrir le régime d'un contraste ϵ comparable à l'unité, où le développement de FOURIER du réseau contient des harmoniques plus élevés. La figure de diffraction présente alors plusieurs bandes latérales.

Chapitre 11

La diffraction d'atomes par l'onde évanescente stationnaire en incidence rasante

Introduction

Nous nous tournons maintenant vers la diffraction d'atomes en incidence rasante. Cette géométrie mérite un intérêt particulier parce la diffraction d'atomes en incidence rasante a pu être observée dans les éxpériences des groupes de W. ERTMER et de V. LORENT [12, 13]. D'un point de vue historique, l'incidence rasante présente l'avantage que l'on peut réfléchir et diffracter un jet d'atomes avec une vitesse assez élevée (un jet thermique, par exemple). En effet, pour assurer la réflexion, il faut comparer le potentiel lumineux de l'onde évanescente stationnaire à la partie normale $E_{zi} = \frac{1}{2}Mv_{zi}^2$ de l'énergie cinétique incidente, et en incidence rasante, cette dernière est beaucoup plus petite que l'énergie cinétique totale du jet. Nous rappelons également que par rapport à la diffraction en transmission près de l'incidence normale, l'incidence rasante présente l'avantage que la séparation angulaire entre les ordres de diffraction est beaucoup plus élevée, tous vecteurs d'onde (atomique et lumineux) restant constants.

L'observation expérimentale de la diffraction en incidence rasante permet de valider les maintes approches théoriques qui ont été développées pour décrire l'interaction d'un atome avec l'onde évanescente stationnaire [10, 101, 134, 18, 78, 79, 80, 81]. La théorie dynamique de la diffraction est en effet dans une situation difficile en ce qui concerne l'incidence rasante : dans l'approche scalaire que nous avons développée aux chapitres précédents, nous avons constaté à plusieurs reprises qu'à cause du facteur d'obliquité β, la diffraction est inefficace en incidence rasante. En particulier,

- du point de vue classique, l'atome traverse un nombre $\xi \gg 1$ de périodes du réseau pendant le temps-type de réflexion ; il est alors soumis à une force qui oscille rapidement et dont l'effet cumulé (le transfert de vitesse) s'annule. Pour un réseau géométriquement mince, la valeur maximale du transfer de vitesse

$\Delta v_x^{\max}$ est proportionnelle au facteur d'obliquité $\beta(\xi)$, donc exponentiellement petite (6.11)

$$\Delta v_x^{\max} \propto \exp(-\pi\xi/2)\,;$$

- dans l'approximation de BORN, la diffraction par l'onde évanescente stationnaire nécessite un transfert de vecteur d'onde vertical $\Delta k_{z,\pm 1}$ qui est généralement grand devant le vecteur d'onde optique en incidence rasante ; or, l'onde évanescente contenant dans la direction normale des vecteurs d'onde limités par la constante de décroissance κ, un transfert de vecteur d'onde $|\Delta k_{z,\pm 1}| \gg \kappa$ est extrèmement improbable et les populations $w_{\pm 1}$ des premiers ordres de diffraction sont proportionnelles à (7.40)

$$w_{\pm 1} \propto \exp(-\pi \Delta k_{z,\pm 1}/\kappa)\,;$$

- dans l'approximation du réseau de phase mince, la fonction d'onde atomique réfléchie par le réseau de diffraction présente une modulation de phase avec une amplitude u_{mod} proportionnelle à (8.79)

$$u_{\mathrm{mod}} \propto \exp(-\pi q \tan\theta_i/\kappa)\,,$$

  qui est tellement faible en incidence rasante que les bandes latérales ont des amplitudes négligeables.

A la lumière de ces résultats, il semble qu'il faille abandonner le modèle du potentiel dipolaire scalaire pour interpréter les observations expérimentales de la diffraction en incidence rasante. Nous montrons dans ce chapitre que tel est en effet le cas.

Dans la première partie 11.1 de ce chapitre, nous allons présenter une première approche alternative à la diffraction qui a été développée pour un atome à deux niveaux par R. DEUTSCHMANN, W. ERTMER et H. WALLIS, alors à l'Université de Bonn (Allemagne) [78]. Nous en rappelons les idées principales, en particulier le rôle crucial que joue l'état excité de l'atome dans le mécanisme de diffraction (paragraphes 11.1.1 et 11.1.2). Au paragraphe 11.1.3, la comparaison au modèle du potentiel dipolaire scalaire nous permettra de donner une interprétation alternative de l'inefficacité de la diffraction en incidence rasante. D'autres approches théoriques seront mentionnées au paragraphe 11.1.4. Au paragraphe 11.1.5, nous comparons l'approche de R. DEUTSCHMANN et ses collègues aux expériences de diffraction d'atomes. Nous montrons alors qu'elle ne peut, elle non plus, rendre compte des résultats expérimentaux. Nous confirmons ainsi, par des arguments analytiques, les résultats négatifs des calculs numériques effectués par le groupe de C. M. SAVAGE à l'Université Nationale d'Australie (Canberra) [80].

Finalement, nous indiquons dans la deuxième partie 11.2 du chapitre l'interprétation théorique de la diffraction d'atomes en incidence rasante qui nous paraît la plus prometteuse : son principe a été donnée de nouveau par R. DEUTSCHMANN, W. ERTMER et H. WALLIS [79], et elle a été confirmée par des calculs numériques de D. GORDON et C. M. SAVAGE [81]. Cette interprétation fait intervenir la structure magnétique interne de l'état fondamental atomique. Mis à part cet élément structural nouveau, la diffraction s'inscrit conceptuellement dans le cadre de l'approche donnée par R. DEUTSCHMANN et ses collègues pour un atome à deux niveaux (des transitions non adiabatiques entre niveaux internes). Nous allons illustrer cette approche à la diffraction à l'aide d'un modèle simplifié pour une transition $J = 1/2 \to J_e = 3/2$.

11.1 La diffraction «assistée» par l'état excité

Dans leur publication «*Reflection and diffraction of atomic de Broglie waves by an evanescent laser wave*»[1], R. DEUTSCHMANN, W. ERTMER et H. WALLIS développent un modèle pour la diffraction d'un atome à deux niveaux par une onde évanescente stationnaire dont nous allons rappeler les éléments essentiels. Nous notons ce modèle par le signet «DEW 1».

11.1.1 Théorie cinématique

L'on se place dans le plan xOz du réseau de diffraction et décrit l'atome par des amplitudes de probabilité $\psi_{g,e}(x, z)$ pour deux états internes, l'état fondamental $|g\rangle$ et l'état excité $|e\rangle$, respectivement. L'équation d'ondes pour ces amplitudes est l'équation de SCHRÖDINGER stationnaire [voir (1.11) du chapitre 1]

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 \begin{pmatrix} \psi_g \\ \psi_e \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & d\mathcal{E}^* \\ d\mathcal{E} & \hbar\Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_g \\ \psi_e \end{pmatrix} = E_i \begin{pmatrix} \psi_g \\ \psi_e \end{pmatrix}, \tag{11.1}$$

où $E_i = \frac{1}{2}M(v_{xi}^2 + v_{zi}^2)$ est l'énergie incidente dans le plan xOz et d est l'élément de matrice du moment dipolaire électrique entre les états g et e. Le champ lumineux est désaccordé de $\Delta \equiv \omega_L - \omega_A$ et son amplitude complexe $\mathcal{E}(x, z)$ est donnée par[2] [voir (5.1)] :

$$\mathcal{E}(x, z) = \left(\mathcal{E}_+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}qx} + \mathcal{E}_- \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx}\right) \mathrm{e}^{-\kappa z}. \tag{11.2}$$

A cause de la périodicité de l'onde évanescente stationnaire, le vecteur d'onde atomique change par des multiples de q dans la direction Ox parallèle au pas du réseau. Ce changement peut également être interprété par des processus d'absorption et d'émission stimulée de photons dans les ondes lumineuses $\mathcal{E}_\pm$. Il est donc commode de décrire le mouvement le long de la direction Ox dans une base d'ondes planes avec les

[1] *Physical Review A* **47**, 2169–2185 (mars 1994).

[2] Pour éviter la confusion avec l'énergie, nous utilisons le symbôle $\mathcal{E}$ pour le champ électrique lumineux. Notons également que les amplitudes $\mathcal{E}_\pm$ dans (11.2) sont réelles pour un choix approprié de l'origine de l'axe Ox.

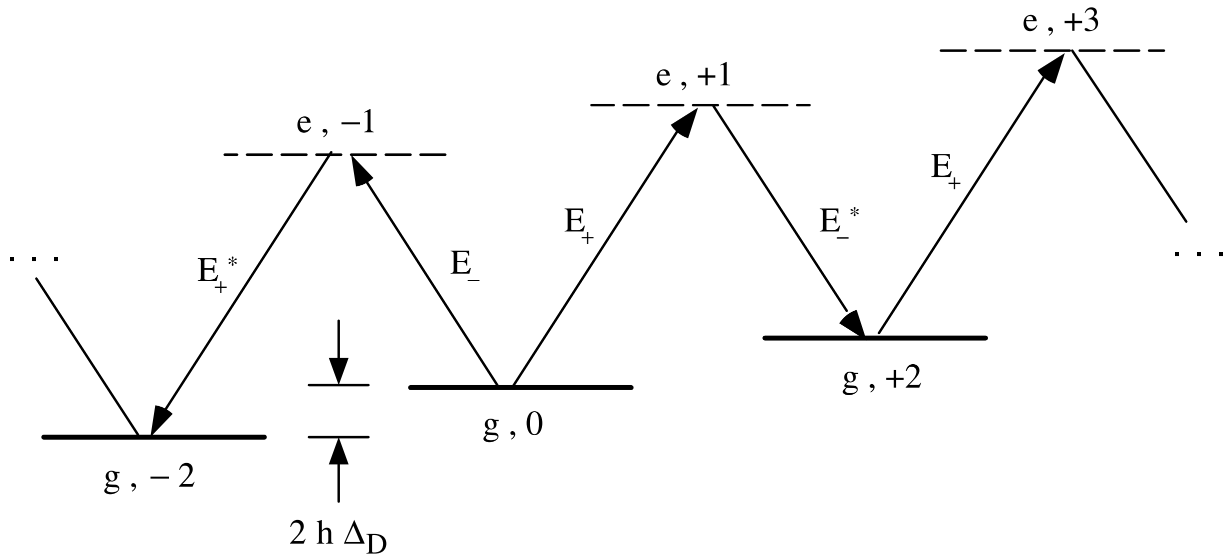

Figure 11.1: Illustration des couplages induits par l'onde évanescente stationnaire entre des états d'ondes planes (pour le mouvement dans la direction Ox).

vecteurs d'onde[3] $k_{x\nu} = k_{xi} + \nu q$. La diffraction amène l'atome soit dans un état fondamental $|g, \nu\rangle$, et l'indice ν est alors pair, soit dans un état excité $|e, \nu\rangle$ avec ν impair. La figure 11.1 montre que l'onde évanescente $\mathcal{E}_+$ qui se propage dans la direction des x croissants, couple les états $|g, \nu\rangle$ et $|e, \nu+1\rangle$, et l'onde $\mathcal{E}_-$ les états $|g, \nu\rangle$ et $|e, \nu-1\rangle$. Par exemple, après une absorption de l'onde $\mathcal{E}_+$ et une émission stimulée dans l'onde $\mathcal{E}_-$, l'atome est passé de l'état $|g, \nu = 0\rangle$ à l'état $|g, \nu = +2\rangle$ et son vecteur d'onde k_{xi} a été augmenté de $2q$.

A cause du désaccord Δ positif entre la fréquence lumineuse et la résonance atomique, la diffraction transfère une énergie cinétique supplémentaire $\hbar\Delta$ à l'atome si celui-ci sort de l'onde évanescente dans un état excité. Cette énergie se retrouve dans la composante verticale $k_{z\nu}$ des vecteurs d'onde diffractés parce que la composante $k_{x\nu}$ est fixée par les transferts de vecteur d'onde discrets, et la composante k_{yi} est conservée. Les vecteurs d'onde diffractés $k_{z\nu}$ valent donc

$$\nu \text{ pair}: \quad k_{z\nu} = \sqrt{k_{zi}^2 - \nu q(2k_{xi} + \nu q)}, \tag{11.3a}$$

$$\nu \text{ impair}: \quad k_{z\nu} = \sqrt{k_{zi}^2 + 2M\Delta/\hbar - \nu q(2k_{xi} + \nu q)}. \tag{11.3b}$$

Ces équations généralisent (7.5) pour les vecteurs d'onde diffractés du modèle scalaire. Dans le diagramme d'EWALD, les ordres de diffraction se trouvent sur deux cercles qui correspondent aux énergies cinétiques E_i et $E_i + \hbar\Delta$ pour les états fondamental et excité, respectivement (voir la figure 11.2).

[3]Dans ce chapitre, pour éviter la confusion avec les chapitres précédents, nous libellons les ordres de diffraction par le nombre ν de photons échangés entre l'atome et l'onde évanescente stationnaire. Dans

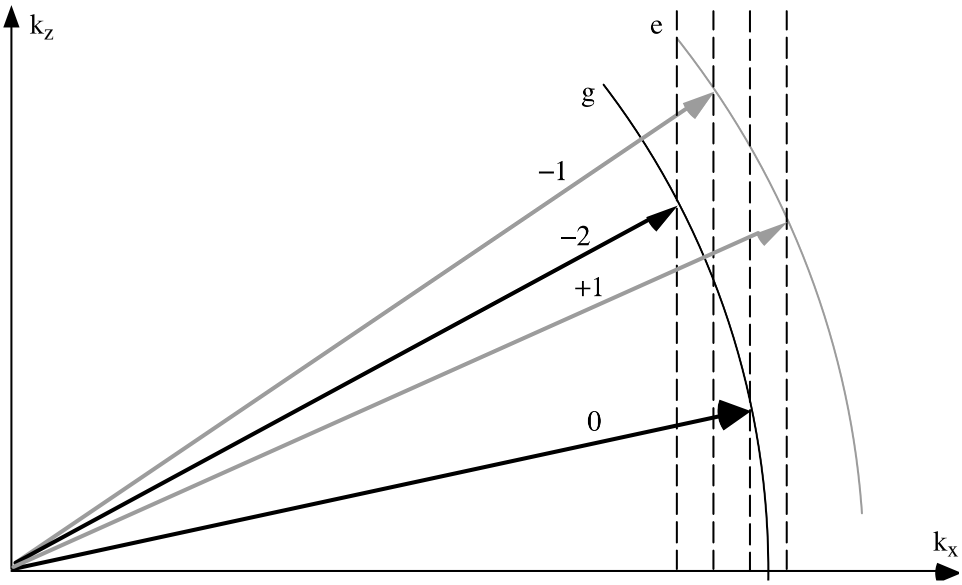

*Figure 11.2: Diagramme d'*EWALD *pour la diffraction d'un atome à deux niveaux.*

Les équations d'ondes couplées

Nous allons nous servir des équations d'ondes couplées pour décrire le couplage entre les ordres de diffraction qu'induit l'onde évanescente stationnaire. Afin de trouver les équations couplées, l'on tire profit de la périodicité du champ lumineux pour développer les amplitudes de probabilité en «ondes partielles» [voir (9.4)]

$$\psi_g(x,z) = \sum_l \chi_{2l}(z)\ \exp \mathrm{i} k_{x,2l} x, \tag{11.4a}$$

$$\psi_e(x,z) = \sum_l \eta_{2l+1}(z)\ \exp \mathrm{i} k_{x,2l+1} x. \tag{11.4b}$$

Les ondes partielles $\chi_{2l}(z)$ et $\eta_{2l+1}(z)$ correspondent à une représentation «impulsion» pour le mouvement parallèle au pas du réseau (des ondes planes repérées par l'indice $\nu = 2l, 2l+1$), et une représentation «position» pour le mouvement le long de la normale Oz. En insérant les développements (11.4) dans l'équation de SCHRÖDINGER (11.1), l'on trouve le système d'équations suivant ($l = 0, \pm 1, \ldots$)

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}\chi_{2l} - (d\mathcal{E}_+\eta_{2l+1} + d\mathcal{E}_-\eta_{2l-1})\,\mathrm{e}^{-\kappa z} + & \\ + \left(2l\hbar\Delta_D + 4l^2 E_q\right)\chi_{2l} &= E_{zi}\chi_{2l} \end{aligned} \tag{11.5a}$$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}\eta_{2l+1} - (d\mathcal{E}_+\chi_{2l} + d\mathcal{E}_-\chi_{2l+2})\,\mathrm{e}^{-\kappa z} + & \\ -\hbar\Delta + \left((2l+1)\hbar\Delta_D + (2l+1)^2 E_q\right)\eta_{2l+1} &= E_{zi}\eta_{2l+1} \end{aligned} \tag{11.5b}$$

---

cette notation, les ordres de diffraction n de la théorie scalaire correspondent aux états fondamentaux $|g, \nu = 2n\rangle$.

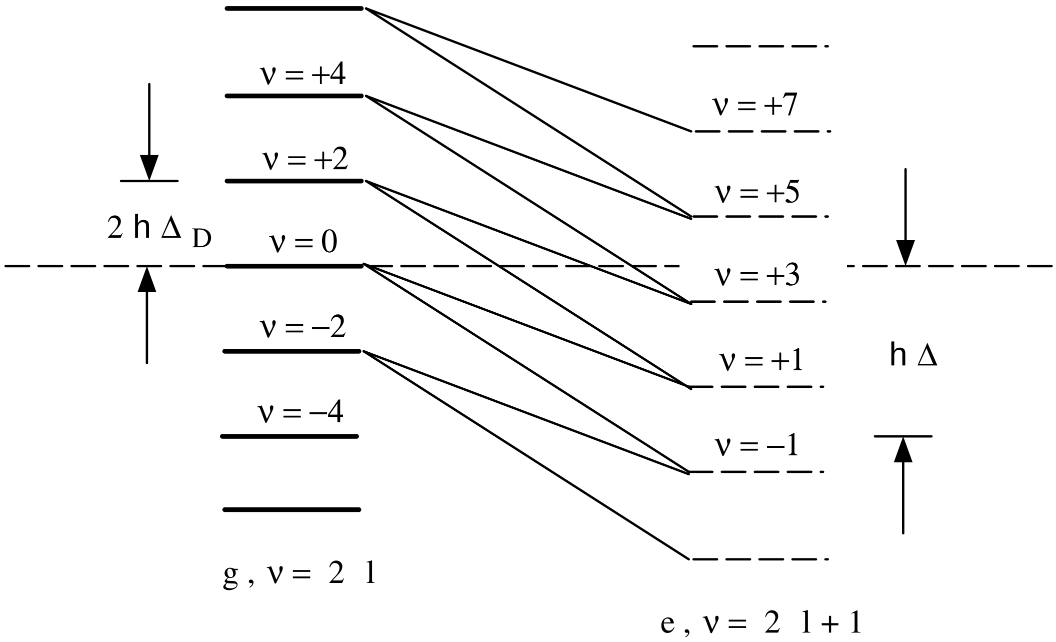

Figure 11.3: Représentation des équations couplées (11.5) par un système à plusieurs niveaux.

où $\Delta_D = qv_{xi}$ est le déplacement DOPPLER de la fréquence lumineuse vue par un atome en mouvement à la vitesse incidente v_{xi}. En incidente rasante, il est beaucoup plus grand que la fréquence de recul associée au vecteur d'onde q, $\hbar\Delta_D \gg E_q = \hbar^2 q^2/2M$. L'énergie cinétique $E_{zi} = \hbar^2 k_{zi}^2/2M$ correspond à la composante verticale k_{zi} du vecteur d'onde incident. Notons en passant, que l'approche choisie par les groupes de D. WALLS et de C. M. SAVAGE consiste à intégrer numériquement les équations couplées (11.5) [134, 80].[4]

L'on peut interpréter les équations couplées (11.5) par l'analogie avec un atome à plusieurs niveaux, comme nous l'avons fait au paragraphe 9.1 (voir la figure 11.3) : en absence de champ laser, les ondes partielles $\chi_{2l}(z)$ pour l'état fondamental correspondent à des « énergies internes » $\approx 2l\,\hbar\Delta_D$, et les ondes partielles $\eta_{2l+1}(z)$ pour l'état excité aux énergies $\approx -\hbar\Delta + (2l+1)\,\hbar\Delta_D$. Les états fondamentaux et excités forment ainsi deux séries de niveaux à peu près équidistantes qui se décalent l'une par rapport à l'autre en fonction du désaccord Δ. Sous l'influence du couplage au champ lumineux, les énergies des états fondamentaux augmentent et celles des états excités diminuent si bien que pour un couplage suffisamment fort, les états seront mélangés entre eux.

[4]Plus précisément, le groupe de C. M. SAVAGE a intégré l'équation de SCHRÖDINGER dépendante du temps, que l'on obtient à partir de (11.5) par le remplacement $E_{zi} \mapsto i\hbar\partial_t$ au second membre.

11.1.2 Le mécanisme de la diffraction

Nous présentons d'abord les niveaux d'énergie des ondes partielles en présence d'une onde évanescente simple. Dans l'approche DEW 1, ces niveaux sont appelés les « potentiels diabatiques ». Ensuite, nous introduisons les potentiels « adiabatiques » pour une onde évanescente stationnaire ; il apparaissent alors des croisements évités entre les niveaux associés à l'état fondamental, d'une part, et l'état excité, d'autre part. Pour une onde atomique en mouvement sur les niveaux adiabatiques, les croisements évités agissent comme des séparatrices. Nous calculons leurs coefficients de transmission et réflexion par le modèle de LANDAU–ZENER.

Potentiels diabatiques

Pour résoudre les équations couplées (11.5), l'approche DEW 1 consiste à utiliser les « niveaux habillés » que l'on obtient en diagonalisant, à une position z donnée, le Hamiltonien de couplage et la partie horizontale de l'énergie cinétique [tous les termes sauf la dérivée seconde au premier membre des équations couplées (11.5)].

Pour une onde évanescente simple, $\mathcal{E}_- = 0$, les déplacements lumineux ainsi obtenues donnent les *potentiels diabatiques* $W_\nu^{(\mathrm{dia})}(z)$ représentés sur la figure 11.4. Dans la limite d'un désaccord $\hbar\Delta$ grand devant le couplage $d\mathcal{E}_+$ et devant l'énergie cinétique E_{zi}, les valeurs propres du Hamiltonien de couplage dans les équations couplées (11.5) valent[5] [voir (1.21)] :

$$W_{2l}^{(\mathrm{dia})}(z) \approx \frac{d^2\mathcal{E}_+^2\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}}{\hbar(\Delta - \Delta_D)} + 2l\hbar\Delta_D, \tag{11.6a}$$

$$W_{2l+1}^{(\mathrm{dia})}(z) \approx -\frac{d^2\mathcal{E}_+^2\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}}{\hbar(\Delta - \Delta_D)} - \hbar\Delta + (2l+1)\hbar\Delta_D. \tag{11.6b}$$

Ces expressions sont représentées sur la figure 11.4 par les courbes en point-tirets et en pointillées. Nous constatons sur la figure qu'elles donnent une bonne approximation des potentiels diabatiques à grande distance de la surface où le champ lumineux est faible. Dans la limite où le désaccord est beaucoup plus grand que le déplacement DOPPLER, $\Delta \gg \Delta_D$, les expressions (11.6) permettent de retrouver le potentiel dipolaire $d^2\mathcal{E}_+^2\mathrm{e}^{-2\kappa z}/\hbar\Delta = V_{\max}\mathrm{e}^{-2\kappa z}$, que nous avons utilisé dans les chapitres précédents [voir (1.16)].

Pour une onde évanescente simple, les niveaux diabatiques se groupent donc en paires $\{W_{2l}^{(\mathrm{dia})}(z), W_{2l+1}^{(\mathrm{dia})}(z)\}$ qui sont découplées les unes des autres. Dans chaque paire, le niveau $W_{2l}^{(\mathrm{dia})}(z)$ rejoint l'état fondamental loin de l'onde évanescente, ce niveau correspond à un déplacement lumineux répulsif ; le deuxième niveau $W_{2l+1}^{(\mathrm{dia})}(z)$ est attractif et rejoint l'état excité. L'onde atomique est réfléchie si elle est incidente dans l'état fondamental et si son énergie cinétique incidente E_{zi} est inférieure à la valeur maximale du potentiel $W_{2l}^{(\mathrm{dia})}(z)$. Par cette condition, l'on peut estimer le nombre

[5] Ici et dans la suite, nous négligerons l'énergie de recul E_q devant le déplacement DOPPLER Δ_D.

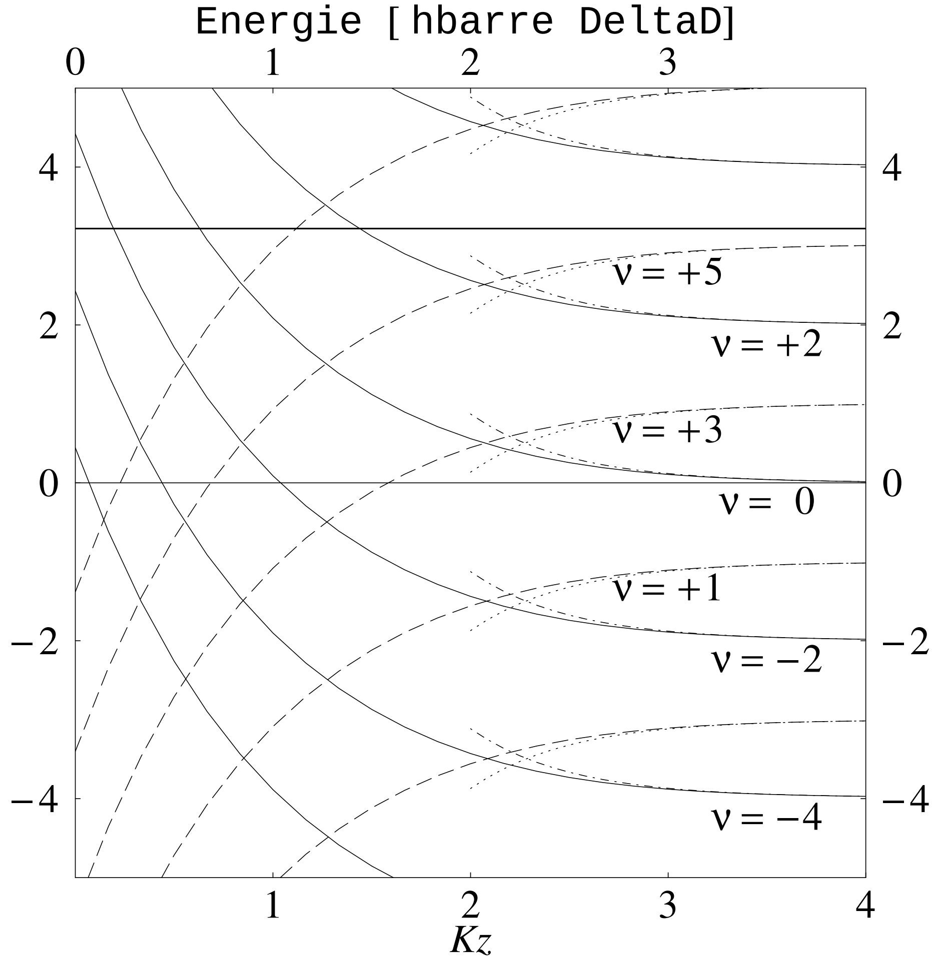

Figure 11.4: Niveaux habillés diabatiques pour une onde évanescente simple, en fonction de la distance du diélectrique. Les déplacements lumineux $W_\nu^{(\text{dia})}(z)$ *sont donnés en unités du déplacement* DOPPLER $\hbar\Delta_D$, *et la distance* z *en unités de la longueur de décroissance* $1/\kappa$ *de l'onde évanescente. Les courbes en pointillées et en point-tirets représentent l'approximation (11.6), valable si l'énergie de couplage est faible.*
Les paramètres sont similaires à la figure 4b de la référence [78]: désaccord $\Delta \simeq 2\,\Delta_D$, *énergies d'interaction* $d\mathcal{E}_+ \simeq 6.9\,\hbar\Delta_D$, $d\mathcal{E}_- = 0$. *L'énergie de recul vaut* $E_q \simeq 8.6 \times 10^{-4}\,\hbar\Delta_D$, *et la ligne horizontale représente une énergie cinétique incidente* $E_{zi} \simeq 3.2\,\hbar\Delta$.

des ordres de diffraction permis : leurs niveaux habillés ont un déplacement lumineux $W_{2l}^{(\mathrm{dia})}(z = 0)$ à la surface du diélectrique supérieur à l'énergie E_{zi} incidente. Pour les niveaux représentés sur la figure 11.4, par exemple, et une énergie incidente $E_{zi} \simeq 3.2\,\hbar\Delta$, le réseau de diffraction peut réfléchir les ordres de diffraction pairs avec $\nu \geq -2, 0, +2$. Si l'atome fait une transition vers un niveau excité, les ordres $\nu = +1, +3, +5$ lui sont accessibles.

Les niveaux adiabatiques et leurs croisements évités

Dans le cas général d'une onde évanescente stationnaire avec un contraste non nul, les déplacements lumineux (11.6) sont modifiés à cause de l'onde contra-propageante $\mathcal{E}_- \neq 0$, mais la différence la plus importante provient de l'interférence entre les ondes $\mathcal{E}_+$ et $\mathcal{E}_-$ qui induit un couplage entre les niveaux diabatiques. La diagonalisation du Hamiltonien de couplage donne alors les *niveaux adiabatiques* $W_\nu^{(\mathrm{ad})}(z)$ représentés sur la figure 11.5. Nous constatons que sous l'influence du couplage, les niveaux adiabatiques se repoussent aux positions ou les niveaux diabatiques $W_\nu^{(\mathrm{dia})}(z)$ se croisent (comparer à la figure 11.4). L'on parle alors d'« anti-croisements » ou de « croisements évités » (*avoided crossing*).

Pour décrire le mouvement de l'atome sur ces niveaux d'énergie, l'on fait dans l'approche DEW 1 l'hypothèse d'un suivi adiabatique sur le niveau adiabatique $W_\nu^{(\mathrm{ad})}(z)$ qui rejoint l'état dans lequel se trouve l'atome incident. Les équations (11.5) se découplent alors complètement, et pour chaque ordre de diffraction, l'onde partielle $\phi_\nu(z)$ vérifie une équation de SCHRÖDINGER scalaire,

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}\phi_\nu - W_\nu^{(\mathrm{ad})}(z)\,\phi_\nu = E_{zi}\,\phi_\nu, \tag{11.7}$$

où le niveau adiabatique $W_\nu^{(\mathrm{ad})}(z)$ joue le rôle d'un potentiel mécanique.

Cependant, si le suivi adiabatique était assuré partout, l'atome resterait sur le niveau $\nu = 0$ sur lequel il est entré, et il atteindrait la surface $z = 0$, ou bien il serait réfléchi spéculairement pour une énergie incidente suffisamment petite. En particulier, l'atome ne passerait pas sur un autre niveau d'énergie pour sortir dans un ordre de diffraction non spéculaire : dans l'approximation adiabatique, il n'y a pas de diffraction. Pour que la diffraction ait lieu dans le modèle DEW 1, il faut donc que le suivi adiabatique ne soit pas assuré. Ceci est précisément le cas dans les croisements évités parce que les niveaux adiabatiques se rapprochent. C'est donc dans un croisement évité que l'atome peut subir une transition non adiabatique vers un autre niveau.[6] Ces transitions constituent l'élément-clé de l'approche DEW 1 à la diffraction.

[6] Notons que la probabilité de transition dépend également de la vitesse à laquelle l'atome passe par le croisement évité. Nous reviendrons à cette question dans le modèle de LANDAU–ZENER pour les transitions non adiabatiques.

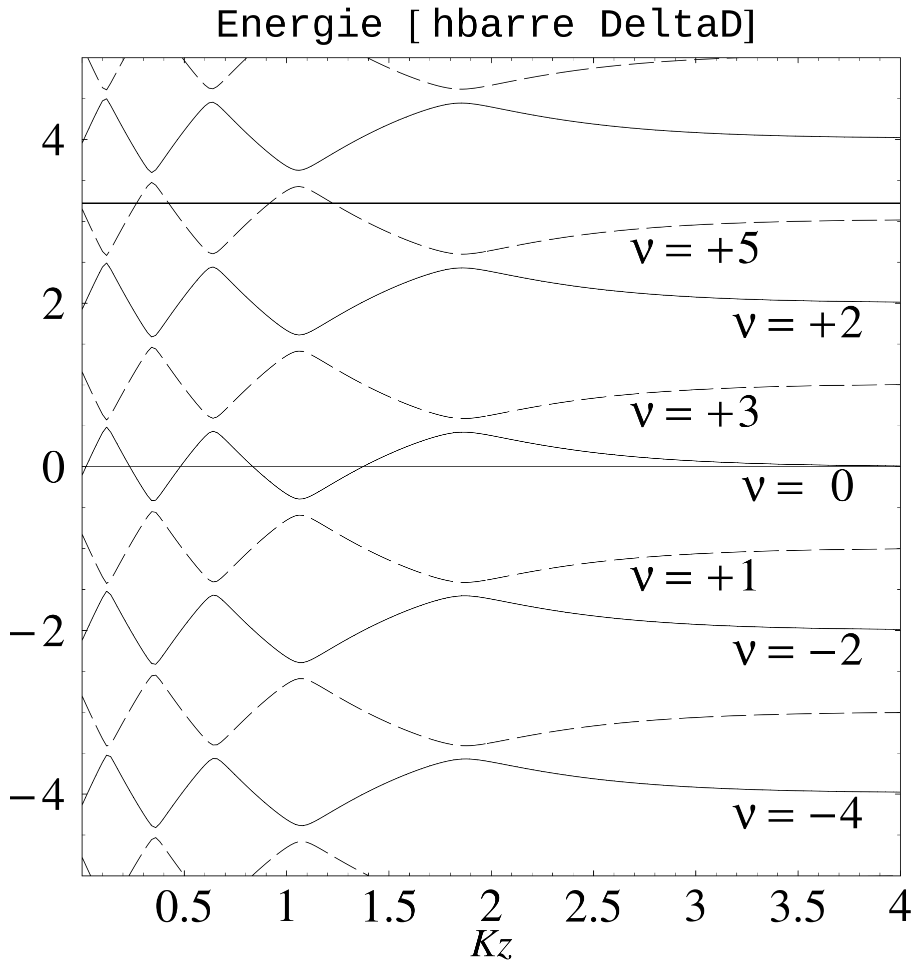

Figure 11.5: Niveaux adiabatiques pour une onde évanescente stationnaire. Les unités sont identiques à la figure 11.4.
Les paramètres sont identiques à la figure 4a de la référence [78]: désaccord $\Delta \simeq 2\,\Delta_D$*, énergies d'interaction* $d\mathcal{E}_+ \simeq 5.4\,\hbar\Delta_D$ *et* $d\mathcal{E}_- \simeq 2.3\,\hbar\Delta_D$*, énergie de recul* $E_q \simeq 8.6 \times 10^{-4}\,\hbar\Delta_D$*. Les niveaux d'énergie ont été obtenus en diagonalisant le Hamiltonien de couplage pour les ordres* $\nu = -20 \ldots + 20$*.*

Interprétation des croisements évités comme des résonances Doppleron

Afin d'interpréter les transitions non adiabatiques aux croisements évités, revenons aux niveaux diabatiques (voir la figure 11.4). Nous notons que ce sont deux niveaux diabatiques de nature différente qui se croisent : un état fondamental qui monte en énergie rencontre un état excité qui lui est abaissé. A un croisement donné, ils sont dégénérés en énergie de sorte que la partie stationnaire de l'onde évanescente induit un couplage résonnant entre eux. Plus précisément, les états fondamental et excité sont couplés par un échange d'un nombre impair de photons. Ce couplage n'est possible que dans une onde stationnaire car il fait intervenir des processus d'absorption d'un photon d'une onde et d'émission stimulée dans l'autre onde.

Considérons à titre d'exemple un atome dans l'état $|g, 0\rangle$ qui passe à l'état $|e, 2l{+}1\rangle$ en absorbant un nombre $l + 1$ de photons de l'onde co-propageante $\mathcal{E}_+$ et en émettant l photons de façon stimulée dans l'onde contra-progageante $\mathcal{E}_-$. Pour trouver la condition de résonance de ce processus, plaçons-nous dans un référentiel en mouvement à la vitesse v_{xi} de l'atome. Sous l'effet DOPPLER, la fréquence ω_L de l'onde co-propageante diminue alors de Δ_D, et celle de l'onde contra-propageante augmente de Δ_D. La transition à $2l + 1$ photons est donc résonnante si

$$\begin{aligned} (l+1)(\omega_L - \Delta_D) - l(\omega_L + \Delta_D) &= \omega_A \\ \iff \quad \omega_L - \omega_A \equiv \Delta &= (2l+1)\Delta_D. \end{aligned} \tag{11.8}$$

Cette résonance a été appelée une résonance « Doppleron » par E. KYRÖLÄ et S. STENHOLM [135, 28]. On emploie également le nom de « *velocity tuned resonance* » puisque la condition de résonance dépend de la vitesse de l'atome, à travers le déplacement DOPPLER.

La condition de résonance (11.8) pour le couplage Doppleron n'est valable que dans un champ lumineux faible. Pour un champ plus intense, les états $|g, 0\rangle$ et $|e, 2l{+}1\rangle$ sont également soumis à des déplacements lumineux, de sorte que la condition de résonance du Doppleron $\Delta = (2l + 1)\Delta_D$ est modifiée et devient[7]

$$W_0^{(\mathrm{dia})}(z_c) = W_{2l+1}^{(\mathrm{dia})}(z_c). \tag{11.9}$$

Dans l'onde évanescente stationnaire, du point de vue de la résonance Doppleron, le couplage entre les niveaux $|g, 0\rangle$ et $|e, 2l + 1\rangle$ devient donc résonnant à la position z_c où se croisent les niveaux diabatiques correspondants.

Grâce au fait que la résonance Doppleron a été le sujet de plusieurs études théoriques [124, 49], nous pouvons évaluer de façon analytique le couplage entre les niveaux $|g, 0\rangle$ et $|e, 2l + 1\rangle$ à la résonance. Nous nous servons de l'approche perturbative de M. MARTE et S. STENHOLM [124], en supposant que l'énergie incidente et les énergies de couplage sont plus petites que le désaccord DOPPLER, ou plus précisément

[7] Rappelons que les décalages DOPPLER $\nu\Delta_D$ sont incorporés dans les niveaux diabatiques $W_\nu^{(\mathrm{dia})}(z)$ (11.6).

$E_{zi}, d\mathcal{E}_\pm \ll 2\hbar\Delta_D$. Dans ce régime perturbatif, l'on peut éliminer adiabatiquement les $2l$ états non résonnants entre les niveaux $|g, 0\rangle$ et $|e, 2l+1\rangle$ pour obtenir les résultats suivants : les déplacements lumineux sont donnés par

$$W_0^{(\mathrm{dia})}(z) \approx V_l\,\mathrm{e}^{-2\kappa z} \tag{11.10a}$$

$$W_{2l+1}^{(\mathrm{dia})}(z) \approx -V_l\,\mathrm{e}^{-2\kappa z} + \hbar\delta_l \tag{11.10b}$$

où $\delta_l = (2l+1)\Delta_D - \Delta > 0$ donne le décalage de la résonance Doppleron par rapport à la condition (11.8) à cause des déplacements lumineux. D'après (11.9), la transition Doppleron est résonnante à la position z_c fixée par

$$\hbar\delta_l = 2V_l\,\mathrm{e}^{-2\kappa z_c}. \tag{11.11}$$

On trouve que les déplacements lumineux sont caractérisés par l'énergie V_l avec

$$V_l = \frac{d^2\mathcal{E}_+^2}{\hbar(\Delta - \Delta_D + \delta_l/2)} + \frac{d^2\mathcal{E}_-^2}{\hbar(\Delta + \Delta_D + \delta_l/2)}, \tag{11.12}$$

et que l'énergie d'interaction C_l entre les états $|g, 0\rangle$ et $|e, 2l+1\rangle$ est égale à [cf. équation (25) de [124] et équation (29) de [49]]

$$C_l = d\mathcal{E}_+ \left(-\frac{d^2\mathcal{E}_+\mathcal{E}_-}{4\hbar^2\Delta_D^2}\right)^l \left(\frac{\Gamma(1-\delta_l/4\Delta_D)}{\Gamma(l+1-\delta_l/4\Delta_D)}\right)^2 \mathrm{e}^{-(2l+1)\kappa z}, \tag{11.13}$$

où $\Gamma(\cdot)$ est la fonction Gamma d'EULER.[8] L'énergie de couplage C_l de la résonance Doppleron donne, du point de vue des niveaux adiabatiques, la séparation des niveaux au croisement évité.

Nous pouvons interpréter l'expression (11.13) du couplage Doppleron comme un calcul en perturbations à l'ordre $2l+1$: nous retrouvons $2l+1$ facteurs avec les amplitudes $\mathcal{E}_\pm\,\mathrm{e}^{-\kappa z}$ du champ, ce qui exprime le fait que la transition Doppleron est un processus à $2l+1$ photons, et au dénominateur le produit des $2l$ différences en énergie des états intermédiaires par lesquels s'effectue le couplage.

Interprétation du croisement évité comme une séparatrice pour l'onde atomique

Lorsque l'atome traverse le croisement évité, les états $|g, 0\rangle$ et $|e, 2l+1\rangle$ sont mélangés entre eux par le couplage Doppleron, et après la traversée, l'atome se trouve dans un état de superposition des deux : le croisement de niveaux agit donc comme une *séparatrice* qui sépare, de façon cohérente, un paquet d'ondes atomiques en deux parties. Ces deux «morceaux» sont ensuite soumis à des potentiels $W_0(z)$ et $W_{2l+1}(z)$ différents et rencontrent d'autres séparatrices en pénétrant davantage dans l'onde évanescente statonnaire.

[8] La fonction Gamma sert de notation compacte pour le produit

$$(l - \delta_l/4\Delta_D)(l-1-\delta_l/4\Delta_D)\ldots(1-\delta_l/4\Delta_D) = \frac{\Gamma(l+1-\delta_l/4\Delta_D)}{\Gamma(1-\delta_l/4\Delta_D)},$$

qui provient des énergies des $2l$ états intermédiaires que l'on a éliminés adiabatiquement.

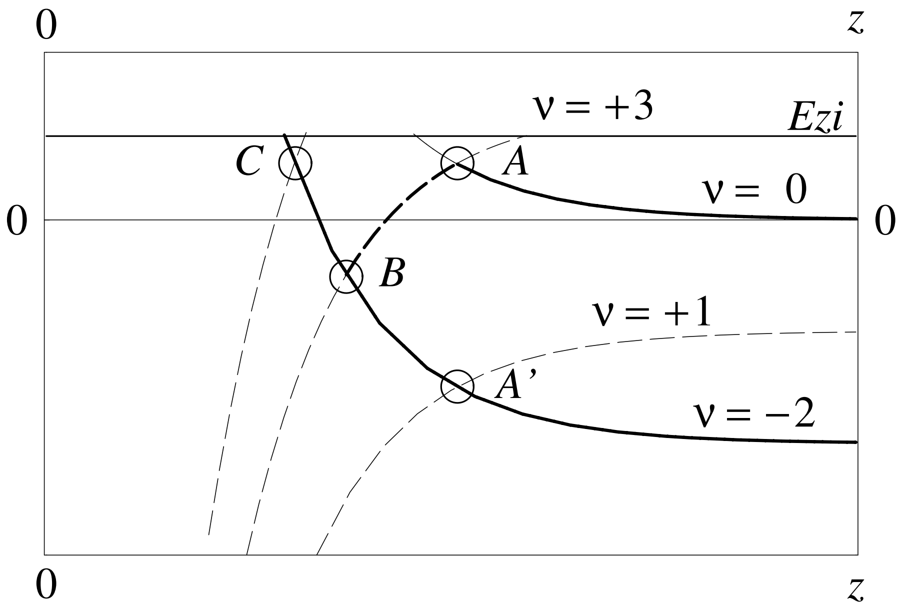

Figure 11.6: Trajectoires sur les niveaux adiabatiques qui relient l'état incident $|g, \nu = 0\rangle$ à l'état diffracté $|g, \nu = -2\rangle$. Pour diffracter l'atome, un couplage Doppleron d'ordre 3 fait passer l'atome au croisement A sur le niveau attractif associé à l'état $|e, \nu = 3\rangle$; au croisement B, un Doppleron d'ordre 5 l'amène sur le niveau répulsif $|g, \nu = -2\rangle$; l'atome est ensuite réfléchi sur le potentiel répulsif après avoir traversé une première fois le croisement C. Pour sortir dans l'état $|g, \nu = -2\rangle$, il traverse après la réflexion les trois croisements C, B et A'.

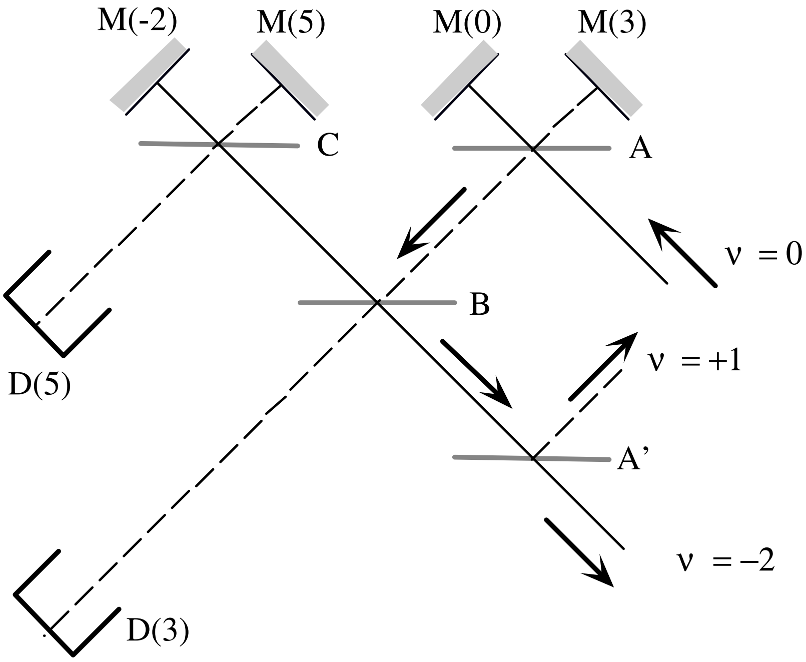

Figure 11.7: Représentation schématique du processus de diffraction à l'aide de séparatrices et de miroirs. Les miroirs correspondent aux points de rebroussement fixés par l'énergie incidente et les potentiels adiabatiques. Les écrans $D(3)$ et $D(5)$ symbolisent la surface du prisme que l'atome atteint sur les niveaux attractifs.

Etudions à titre d'exemple la situation représentée sur la figure 11.6 où nous avons représenté les potentiels diabatiques qui amènent l'atome à sortir dans l'ordre de diffraction $\nu = -2$. Les courbes en tirets (en trait plein) correspondent à des niveaux attractifs (répulsifs). Sur la figure 11.7, nous avons schématisé le même processus à l'aide de séparatrices et de miroirs. Les miroirs correspondent aux réflexions par les points de rebroussement dans les potentiels lumineux. Nous constatons que pour atteindre le potentiel qui rejoint l'ordre de diffraction $\nu = -2$, l'atome est «réfléchi» par la séparatrice A pour passer sur le niveau attractif $\nu = +3$ (la courbe AB en tirets épais) et est réfléchi de nouveau par la séparatrice B. Pour sortir dans l'ordre $\nu = -2$, il faut que l'atome soit d'abord transmis deux fois par la séparatrice C, et ensuite par les séparatrices B et A' au chemin retour. En somme, l'atome traverse quatre croisements évités A, B, C, A' avant de sortir de l'onde évanescente. Le schéma 11.7 montre en outre que l'onde atomique subit des réflexions multiples dans les potentiels adiabatiques (entre les miroirs $M(0)$ et $M(3)$, par exemple). Ces réflexions multiples donnent lieu a des franges d'interférence dans les populations des ordres de diffraction en fonction du vecteur d'onde incident (les «oscillations de STÜCKELBERG»).

Pour calculer les populations diffractées, il faut donc connaître, d'une part, les amplitudes de réflexion et de transmission pour les séparatrices marquées A, B, C, A' sur le schéma 11.7, et d'autre part, les phases associées à la propagation dans les potentiels

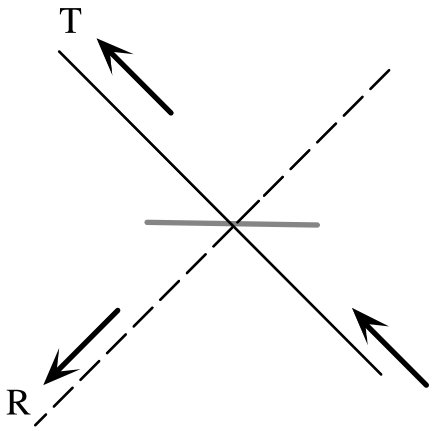

Figure 11.8: Définition de la transmission T et de la réflectivité R du croisement évité.

lumineux entre les séparatrices et lors des réflexions au points de rebroussement (les points $M(-2), M(0), M(3)$ et $M(5)$ sur le schéma 11.7). Ceci est un problème complexe qui a été résolu par R. DEUTSCHMANN et ses collègues moyennant une combinaison d'approches numériques et analytiques. Une difficulté particulière provient du fait que nombre de croisements évités se trouvent dans une région où le champ lumineux est fort et qu'une approche perturbative n'est plus possible.

Modèle simplifié pour la séparatrice

Nous avons ici une ambition plus modeste et cherchons à identifier les paramètres physiques pertinents pour la première séparatrice atomique (marquée A sur les figures 11.6 et 11.7). Nous partons du modèle de LANDAU–ZENER pour les transitions non adiabatiques. Cette approche permet de définir la transmission T de la séparatrice comme la probabilité que l'atome continue de suivre, après le croisement évité, le potentiel diabatique $W_0^{(\mathrm{dia})}(z)$, comme si la séparatrice n'existait pas (voir la figure 11.8). De façon analogue, la réflectivité R de la séparatrice correspond à la probabilité de trouver l'atome après le croisement sur l'autre courbe de potentiel (attractive si l'atome était incident sur une courbe répulsive, par exemple).

Pour utiliser le modèle de LANDAU–ZENER, nous allons faire les approximations suivantes : nous supposons que le couplage C_l (11.13) dû à la résonance Doppleron soit constant à travers le croisement évité[9], nous linéarisons les potentiels $W_0(z)$ et $W_{2l+1}(z)$ autour de la position z_c du croisement

$$W_0^{(\mathrm{dia})}(z) \approx W_0^{(\mathrm{dia})}(z_c) + (z_c - z)F_0, \tag{11.14a}$$
$$W_{2l+1}^{(\mathrm{dia})}(z) \approx W_{2l+1}^{(\mathrm{dia})}(z_c) - (z_c - z)F_{2l+1}, \tag{11.14b}$$

[9]En vue de la variation rapide de (11.13) avec z, cette approximation paraît assez grossière, mais nous allons nous en contenter pour estimer l'ordre de grandeur de la transmission et de la réflectivité de la séparatrice.

et nous supposons, dans un esprit semi-classique, que l'atome passe à travers le croisement évité avec une vitesse constante v_c qui dépend de l'énergie potentielle $W_0^{(\mathrm{dia})}(z_c)$ à cause de la conservation de l'énergie. Le modèle de LANDAU–ZENER donne alors les expressions suivantes pour la réflectivité et la transmission [136, 122] :

$$T_{\mathrm{LZ}} = \exp\left(-\frac{2\pi C_l^2}{\hbar v_c |F_0 + F_{2l+1}|}\right), \qquad R_{\mathrm{LZ}} = 1 - T_{\mathrm{LZ}}. \tag{11.15}$$

Dans le cas particulier d'un atome extrèmement lent, $v_c \to 0$, la réflectivité R tend vers l'unité parce que l'atome suit adiabatiquement les niveaux diagonalisés à travers le croisement évité.[10] Un autre cas limite est celui d'une onde évanescente simple. Le couplage C_l s'annule alors et aucun transfert de population a lieu à la résonance : l'atome traverse le croisement tout en restant sur le potentiel diabatique initial. Finalement, un cas intéressant pour la diffraction est une séparatrice qui crée une superposition à poids égaux entre les deux états finaux, comme le suggère le schéma 11.7. La formule de LANDAU–ZENER implique qu'il faut alors ajuster le couplage C_l et les autres paramètres de façon à avoir

$$\frac{C_l^2}{\hbar v_c |F_0 + F_{2l+1}|} = \frac{\ln 2}{2\pi} \approx 0.11. \tag{11.16}$$

Pour vérifier cette approche perturbative, nous allons nous en servir pour caractériser la séparatrice A du schéma 11.7 dans une situation où R. DEUTSCHMANN et ses collègues ont trouvé, par un calcul plus précis, que les populations des ordres de diffraction pairs sont optimisées. Ils ont déterminé que cet optimum correspond au jeu de paramètres suivant :

$$\begin{array}{rcl@{\qquad}rcl}
\Delta & \simeq & 2\,\Delta_D, & d\mathcal{E}_+ & \simeq & 2.33\, d\mathcal{E}_- \simeq 5.4\,\hbar\Delta_D, \\
E_{zi} & \simeq & 3.2\,\hbar\Delta_D & E_q & \simeq & 8.6\times 10^{-4}\,\hbar\Delta_D \\
(v_{zi} & \simeq & 122\,\hbar\kappa/M), & & \simeq & 5.6\,\hbar^2\kappa^2/2M.
\end{array} \tag{11.17}$$

Sur la figure 11.9, nous comparons les énergies des niveaux habillés que l'on obtient en diagonalisant le Hamiltonien de couplage pour les paramètres (11.17), aux prédictions de l'approche perturbative pour le couplage Doppleron. Cette dernière approche prédit que la séparation des niveaux au croisement évité vaut $2|C_l|$, ce qui est représenté par les deux traits horizontaux sur la figure. Nous constatons que cette prédiction est en bon accord avec la séparation des niveaux adiabatiques obtenus par le calcul complet (les courbes en trait plein et en tirets). Les courbes en point-tirets et en pointillées donnent les potentiels diabatiques (11.10) du calcul perturbatif, elles rejoignent les niveaux exacts de façon satisfaisante dans la région $z > z_c$ en amont du croisement évité. Elles s'écartent des niveaux exacts dans la région $z < z_c$ parce que le calcul perturbatif n'y est plus valable.

[10] Notons cependant que dans ce cas limite, notre approche semi-classique ne serait plus valable.

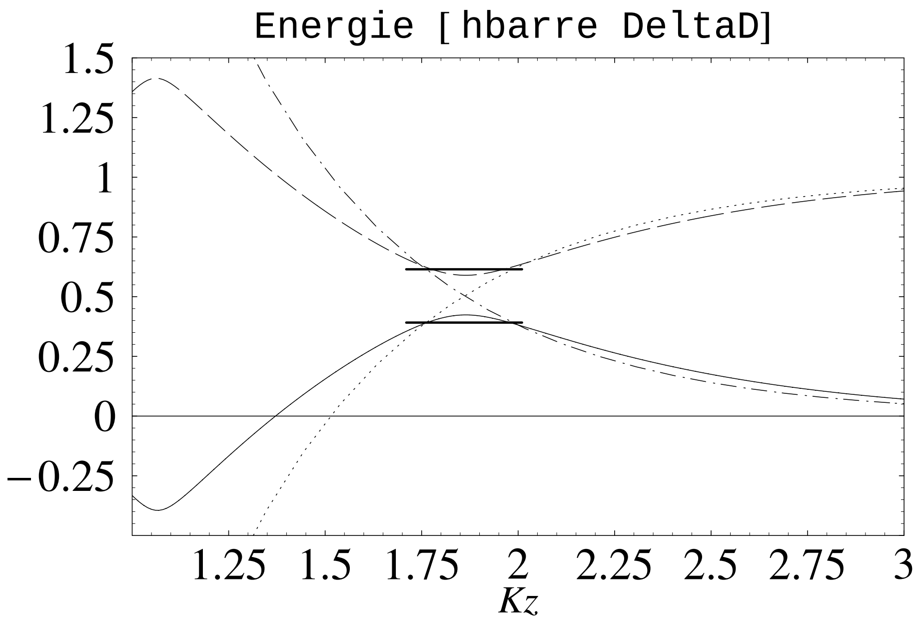

Figure 11.9: Comparaison entre le calcul complet des niveaux habillés et l'approche perturbative pour le couplage Doppleron.
Trait plein : niveau adiabatique $W_0^{(\mathrm{ad})}(z)$, *tirets : niveau adiabatique* $W_3^{(\mathrm{ad})}(z)$, *point-tirets : calcul perturbatif du niveau diabatique (non-couplé)* $W_0^{(\mathrm{dia})}(z)$, *pointillées :* $W_3^{(\mathrm{dia})}(z)$. *L'approche perturbative prédit un couplage résonnant à l'intersection entre les niveaux diabatiques. L'energie de couplage* C_l *est représentée par les deux traits horizontaux dont la distance vaut* $2|C_l|$. *Cette distance est à comparer à l'écart minimal entre les niveaux adiabatiques dans le croisement évité.*

En utilisant l'expression (11.13) pour l'énergie de couplage C_l, la formule de LANDAU–ZENER (11.15) donne une transmission $T_{\rm LZ} \approx 75\,\%$. Nous notons que pour ce choix de paramètres, l'atome rencontre sur le niveau diabatique $W_0(z)$ encore deux croisements évités (voir la figure 11.5) qui peuvent, eux aussi, l'amener vers d'autres ordres de diffraction. Cette valeur intermédiaire entre $50\,\%$ et $100\,\%$ pour la transmission de la première séparatrice paraît donc raisonnable pour optimiser les populations des ordres pairs $\nu = \pm 2$. Les populations diffractées sont néanmoins de l'ordre de quelques pour cent seulement parce que l'atome passe par au moins quatre croisements évités (voir la figure 11.6), avant de sortir de l'onde évanescente.[11] Avec l'approximation grossière $T \sim R \sim 50\,\%$ qui correspond au maximum du produit $T\,R$, les populations valent $w_{\pm 2} \sim (1/2)^4 = 6.25\,\%$. Ceci est en effet l'ordre de grandeur des populations qu'ont trouvées R. DEUTSCHMANN et ses collègues par un calcul plus précis.

11.1.3 Comparaison au régime de faible saturation

Nous comparons maintenant l'approche DEW 1 développée dans le groupe de Bonn au modèle du potentiel dipolaire scalaire que nous étudions dans ce mémoire.

Une approche plus générale

Notons tout d'abord que l'approche DEW 1 s'inscrit dans un cadre plus général parce qu'elle part des équations d'ondes exactes pour un atome à deux niveaux, alors que le modèle scalaire n'est valable que dans une certaine limite où l'on peut éliminer l'état excité. Ceci implique immédiatement que le modèle scalaire ne peut reproduire le mécanisme de diffraction assistée par l'état excité qui a été identifié dans l'approche DEW 1. Par contre, nous nous attendons à ce que l'approche DEW 1 permet de retrouver les résultats du modèle scalaire dans le domaine de validité de ce dernier. C'est précisément ce que nous allons faire dans ce paragraphe. L'approche DEW 1 éclairera alors d'un point de vue différent les résultats obtenus aux chapitres précédents.

L'approche DEW 1 s'inscrit pour d'autres raisons encore dans un cadre plus général que le modèle scalaire : à la différence de l'approximation du réseau de phase mince, par exemple, elle tient compte exactement de la conservation de l'énergie parce qu'elle part des équations d'ondes couplées. En outre, elle n'est pas limitée au régime semi-classique alors que c'est le cas pour l'approximation du réseau de phase mince qui utilise des trajectoires classiques pour calculer les amplitudes de diffraction. Néanmoins, nous allons nous limiter au régime semi-classique dans la suite parce qu'il est pour l'instant le seul qui ait été réalisé dans l'expérience. Les situations étudiées par R. DEUTSCHMANN et ses collègues se trouvent d'ailleurs également dans ce régime [voir les paramètres optimisés (11.17)].

[11] Ceci correspond au nombre minimal de croisements évités pour la diffraction dans les ordres $\nu = \pm 2$ (voir les figures 11.5 et 11.6).

Pour comparer au modèle scalaire, nous sommes donc limités aux résultats de l'approximation de BORN du chapitre 7.[12] Nous les avons déjà rappelés en l'introduction, à savoir que les populations diffractées sont exponentiellement petites en incidence rasante. Se posent donc les questions suivantes :

- dans le régime de validité du modèle scalaire, l'approche DEW 1 permet-elle de confirmer que la diffraction est absente en incidence rasante ?
- comment peut-on interpréter dans le cadre de l'approche DEW 1 l'efficacité de la diffraction en incidence normale ou oblique prédite par le modèle scalaire ?

Deux ingrédients de l'approche DEW 1 nous permettront de répondre à ces questions : d'une part le rôle de relais que joue l'état excité dans l'approche DEW 1, et d'autre part l'hypothèse du suivi adiabatique, entre les croisements évités, sur les niveaux adiabatiques.

Le couplage à l'état excité à la limite d'un grand désaccord

Rappelons que dans le modèle scalaire, l'on élimine adiabatiquement l'état excité et que ceci est justifié dans le régime où le désaccord $\hbar\Delta$ est grand devant l'énergie incidente $E_i = \frac{1}{2}M(v_{xi}^2 + v_{zi}^2)$ et devant l'énergie d'interaction $d\mathcal{E}$. Notons que le déplacement DOPPLER $\Delta_D = qv_{xi}$ est alors également petit devant le désaccord Δ. Du point de vue des potentiels adiabatiques de l'approche DEW 1 (représentés sur la figure 11.6), le premier croisement évité que l'atome rencontre fait donc intervenir une résonance Doppleron à un nombre de photons très élevé : $2l + 1 \sim \Delta/\Delta_D \gg 1$. Il s'ensuit que le couplage C_l (11.13) est de l'ordre de

$$|C_l| \sim d\mathcal{E} \left(\frac{d\mathcal{E}}{\hbar\Delta} \mathrm{e} \right)^{2l}, \tag{11.18}$$

donc très petit à cause du régime $d\mathcal{E} \ll \hbar\Delta$ (faible saturation) qui permet d'éliminer l'état excité. Par conséquent, la transition non adiabatique vers le potentiel diabatique associé à l'état excité est inefficace [voir le coefficient de transmission (11.15)], et l'atome continue de suivre le niveau diabatique dans lequel il est entré dans l'onde évanescente. L'on peut tout aussi bien ignorer les potentiels diabatiques associés à l'état excité, et l'on retrouve alors le modèle scalaire dans la formulation des équations d'ondes couplées. Notons que cet argument utilise seulement l'hypothèse que le décalage DOPPLER soit faible devant le désaccord et qu'il est donc valable quel que soit l'angle d'incidence.

La diffraction assistée par l'état excité, mécanisme identifié dans l'approche DEW 1, n'est donc possible que si le couplage Doppleron vers l'état excité est efficace.

[12]Pour la diffraction de BRAGG, nous avons certes utilisé, au chapitre 9, des équations d'ondes couplées (9.5), mais nous nous sommes alors concentré aux résonances de BRAGG qui ont lieu au voisinage de l'incidence normale.

Ceci correspond à un désaccord Δ qui ne soit pas trop grand devant le déplacement DOPPLER Δ_D ou à une forte saturation de la transition atomique [voir les paramètres optimisés (11.17)]. Notons que dans le deuxième cas, l'émission spontanée commence à jouer un rôle important et qu'elle réduit la réfléctivité de l'onde évanescente. Si par contre le désaccord est grand par rapport au décalage DOPPLER, le couplage Doppleron entre les niveaux fondamentaux et excités est négligeable, et ce n'est pas par l'assistance de l'état excité que la diffraction peut avoir lieu.

Interprétation de la diffraction en incidence normale et oblique dans le cadre de l'approche DEW 1

Nous nous plaçons maintenant dans le régime d'un désaccord grand où l'élimination adiabatique de l'état excité est justifiée. Les potentiels adiabatiques donnés par l'approche de DEW 1 sont alors tous répulsifs (voir la figure 11.10), et à première vue, il n'y a pas de diffraction : l'atome ne sortirait-il pas dans le même potentiel adiabatique dans lequel il est entré dans l'onde évanescente ? Nous montrons maintenant que la diffraction est néanmoins possible parce que le suivi adiabatique sur les niveaux adiabatiques de l'état fondamental n'est pas assuré en incidence oblique ou normale.

Plus précisément, les niveaux adiabatiques sont séparés en énergie les uns des autres par une distance de l'ordre de $2\hbar\Delta_D$ en incidence oblique et de l'ordre de $\simeq E_q$ en incidence normale (voir la figure 11.10). Supposons maintenant qu'un paquet d'ondes atomiques soit incident sur le niveau $\nu = 0$ et qu'il se trouve autour de la position z en mouvement à la vitesse v_z (voir la figure 11.11). Comme les états propres associés aux potentiels adiabatiques dépendent de la distance z, le mouvement de l'atome induit un couplage non adiabatique vers les niveaux voisins. Ce couplage est caractérisé par une fréquence $\Omega_{\text{n.ad.}}$, et pour le couplage vers les niveaux $\nu = \pm 2$, en incidence oblique et pour un contraste faible, l'on trouve que $\Omega_{\text{n.ad.}}$ est de l'ordre de

$$\Omega_{\text{n.ad.}} \simeq \kappa v_z \frac{\epsilon W_0^{(\text{dia})}(z)}{2\hbar\Delta_D}, \tag{11.19}$$

où $W_0^{(\text{dia})}(z)$ est le déplacement lumineux diabatique et $\epsilon \equiv 2|\mathcal{E}_+\mathcal{E}_-|/(\mathcal{E}_+^2 + \mathcal{E}_-^2)$ le contraste de l'onde évanescente stationnaire. Pour interpréter l'expression (11.19), rappelons que la partie stationnaire de l'onde évanescente «contamine» l'état propre du niveau habillé $W_0^{(\text{dia})}(z)$ par les états $|g, \pm 2\rangle$. Pour un contraste faible, la contamination correspond à une amplitude de probabilité de l'ordre de $\epsilon W_0^{(\text{dia})}(z)/4\hbar\Delta_D$. Cette amplitude varie sur une échelle spatiale $1/2\kappa$, et la fréquence $\Omega_{\text{n.ad.}}$ en donne la vitesse de changement vue par un atome en mouvement à la vitesse v_z. Pour la probabilité $w_{\text{n.ad.}}$ de transition non adiabatique vers les niveaux d'énergie $W_{\pm 2}(z)$, l'estimation donnée

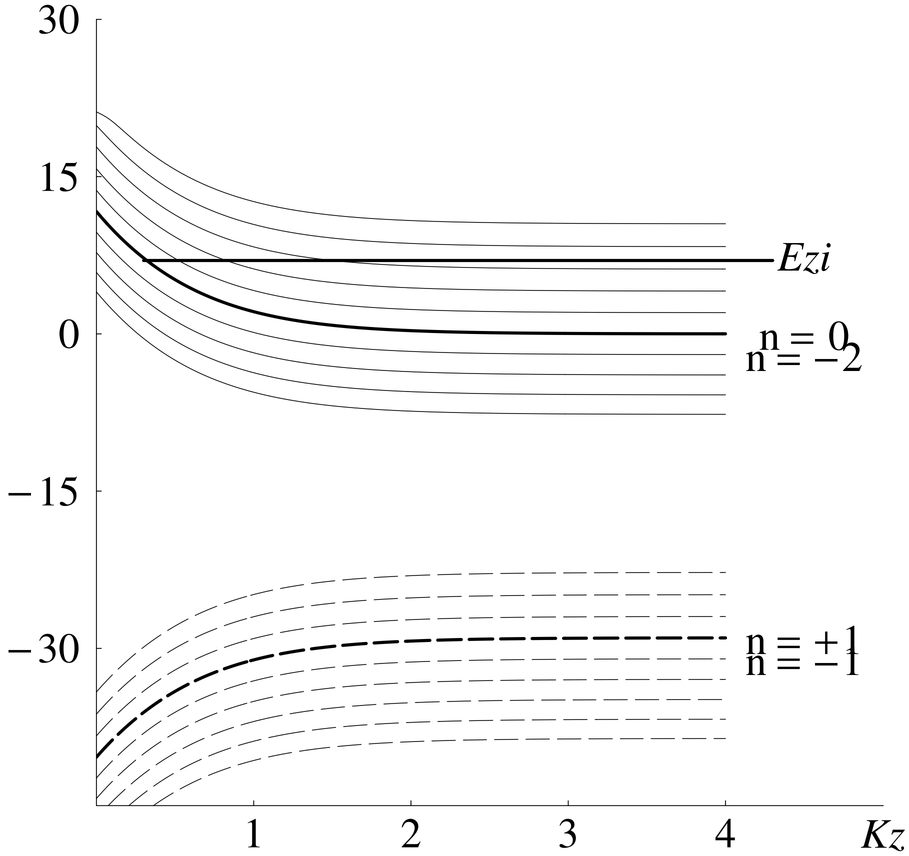

Figure 11.10: Potentiels adiabatiques dans la limite de faible saturation, pour un atome en incidence oblique (angle d'incidence $\theta_i \simeq 70°$). Les potentiels sont donnés en unités du déplacement DOPPLER $\hbar\Delta_D$*, et la position en unités de la longueur de décroissance* $1/\kappa$ *de l'onde évanescente.*
Trait plein (tirets) : potentiels asssciés à l'état fondamental (excité), trait épais : potentiels pour les ordres $\nu = 0, +1$. Les potentiels sont donnés en unités du déplacement DOPPLER $\hbar\Delta_D$*, et la position z en unités de* $1/\kappa$*.*
Paramètres : désaccord $\Delta = 30\,\Delta_D$, énergie de recul $E_q = \hbar\Delta_D/200$, énergies d'interaction $d\mathcal{E}_+ = 20\,\hbar\Delta_D$, $\mathcal{E}_- = 0.5\,\mathcal{E}_+$, correspondant à un contraste $\epsilon \simeq 0.8$. L'énergie incidente vaut $E_{zi} = 7\,\hbar\Delta_D$ $(v_{zi} \simeq 37\,\hbar q/M)$.

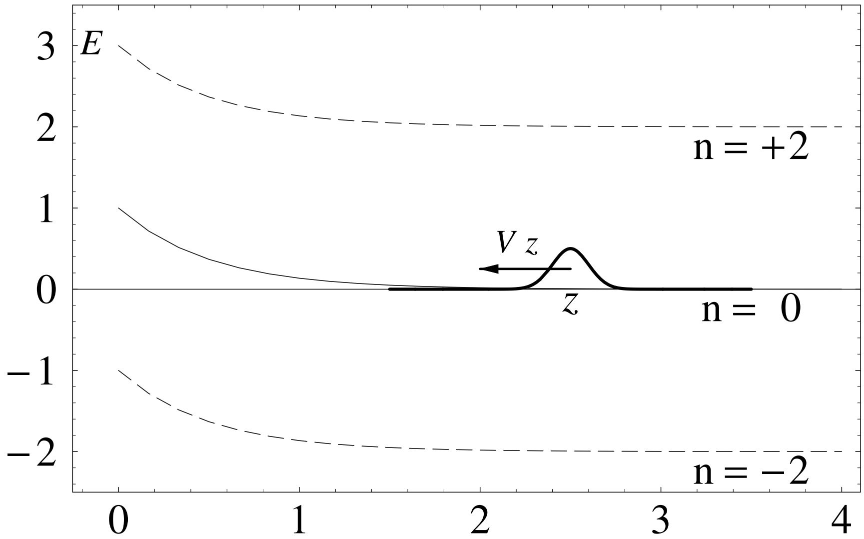

Figure 11.11: Paquet d'onde atomique incident dans le niveau diabatique $\nu = 0$. En tirets : les niveaux diabatiques voisins $\nu = \pm 2$.

par MESSIAH[13] implique alors

$$w_{\text{n.ad.}} \leq \left(\frac{\max |\Omega_{\text{n.ad.}}|}{\min |W_0^{(\text{dia})} - W_{\pm 2}^{(\text{dia})}|} \right)^2 \overset{(*)}{\leq} \left(\frac{\epsilon}{3\sqrt{3}} \frac{\kappa v_{zi}}{2\Delta_D} \frac{E_{zi}}{\hbar \Delta_D} \right)^2 \tag{11.20}$$

où nous avons pris, à l'inégalité $(*)$, la valeur maximale du produit $v_z W_0^{(\text{dia})}(z) = (2/3\sqrt{3}) v_{zi} E_{zi}$ que l'on déduit de la conservation de l'énergie. Si nous fixons la composante normale v_{zi} de la vitesse incidente, la transition non adiabatique est négligeable si

$$\xi \equiv \frac{2\Delta_D}{\kappa v_{zi}} \gg \left(\frac{\epsilon}{3\sqrt{3}} \frac{v_{zi}}{\hbar\kappa/M} \right)^{1/2} \tag{11.21}$$

où ξ est le paramètre d'obliquité classique que nous avons introduit au chapitre 6. La condition (11.21) montre que c'est donc seulement en incidence rasante, $\xi \gg 1$, que l'atome suit adiabatiquement les potentiels associés aux ordres de diffraction $|g, \nu = 2n\rangle$. En incidence normale ou oblique par contre, où $\xi \lesssim 1$, l'atome ne suit pas adiabatiquement le niveau $|g, 0\rangle$ par lequel il est entré dans l'onde évanescente. Le suivi adiabatique est certes assuré pour un contraste ϵ nul parce que les états $|g, 0\rangle$ et $|g, -2\rangle$ se découplent, mais un contraste faible (de l'ordre de $\epsilon \gtrsim \xi^2 \kappa / k_{zi}$) est déjà suffisant pour créer des transitions non adiabatiques entre les états fondamentaux.

En incidence normale ou oblique, la diffraction apparaît donc de nouveau comme une violation de l'approximation adiabatique. Mais contrairement à l'incidence rasante, les états habillés des niveaux $W_{2n}^{(\text{ad})}(z)$ sont constamment mélangés entre eux

[13] A. MESSIAH, *Mécanique Quantique*, nouvelle édition (1995), t. 2, chap. XVII, § 13.

dans l'onde évanescente, et le couplage non adiabatique n'est pas localisé à une position précise. Par conséquent, l'image de la diffraction donnée par l'approche DEW 1 est mal adaptée en incidence normale et oblique pour prédire de façon quantitative les populations des ordres de diffraction. Dans cette situation, il est techniquement plus efficace de choisir comme point de départ les niveaux diabatiques qui correspondent au déplacement lumineux moyen $V_{\max}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}$. Le couplage entre les niveaux est alors induit par la partie modulée du déplacement lumineux, proportionnelle au contraste ϵ, qui est non nulle sur toute l'épaisseur de l'onde évanescente. Dans l'approximation de BORN (chapitre 7), les populations diffractées sont alors obtenues en intégrant le couplage entre les fonctions d'onde dans les niveaux diabatiques. L'approximation du réseau de phase mince (chapitre 8) suit une démarche analogue en accumulant un déphasage pendant le processus de réflexion. Ceci explique aussi que la diffraction peut être plus efficace en incidence normale qu'en incidence rasante : en effet, le maximum des populations $w_{\nu=\pm 2}$ (8.85) dans l'approximation du réseau de phase mince est de l'ordre de $30\,\%$, alors qu'en incidence rasante, l'approche DEW 1 donne des populations optimisées de l'ordre de $6\,\%$.

L'estimation (11.21) montre également qu'en incidence rasante, $\xi \gg 1$, l'atome suit en effet les potentiels adiabatiques associés à l'état fondamental. Nous trouvons ainsi une interprétation alternative de la coupure de l'efficacité de diffraction en incidence rasante dans le cadre du modèle scalaire : la séparation des niveaux habillés associés aux ordres de diffraction est suffisamment grande pour que l'atome suive adiabatiquement le niveau d'énergie dans lequel il est entré dans l'onde évanescente stationnaire. Il n'y a pas de transfert vers les ordres non spéculaires, à moins qu'il soit «assisté» par le passage dans l'état excité.

Conclusion. Le schéma 11.12 permet d'illustrer les différences entre l'approche de R. DEUTSCHMANN et ses collègues et celle du potentiel dipolaire scalaire. Il apparaît que les deux approches donnent des descriptions complémentaires pour la diffraction d'atomes par l'onde évanescente stationnaire : dans l'approche DEW 1, la diffraction n'est efficace que si le désaccord est comparable au déplacement DOPPLER (en bas à gauche sur le schéma 11.12) parce que l'état excité sert de relais entre les ordres de diffraction et que le couplage entre les états fondamental et excité est induit par une transition à plusieurs photons, la résonance Doppleron. En incidence normale ou oblique (en haut à gauche), le désaccord serait tellement petit que l'émission spontanée rendrait impossible la diffraction, voire la réflexion même des atomes.

Dans l'approche du potentiel scalaire par contre, l'on se place dans le régime d'un grand désaccord, $\Delta \gg \Delta_D$, pour éliminer l'état excité. La diffraction assistée par l'état excité est alors inefficace (la partie droite du schéma 11.12). En incidence rasante, l'atome suit adiabatiquement le niveaux habillé par lequel il est entré dans l'onde évanescente ; il n'y a pas de diffraction (en bas à droite sur le schéma 11.12). En incidence oblique et normale (en haut à droite), de forts couplages non adiabatiques entre les niveaux habillés dans l'état fondamental sont créés lorsque l'atome traverse l'onde

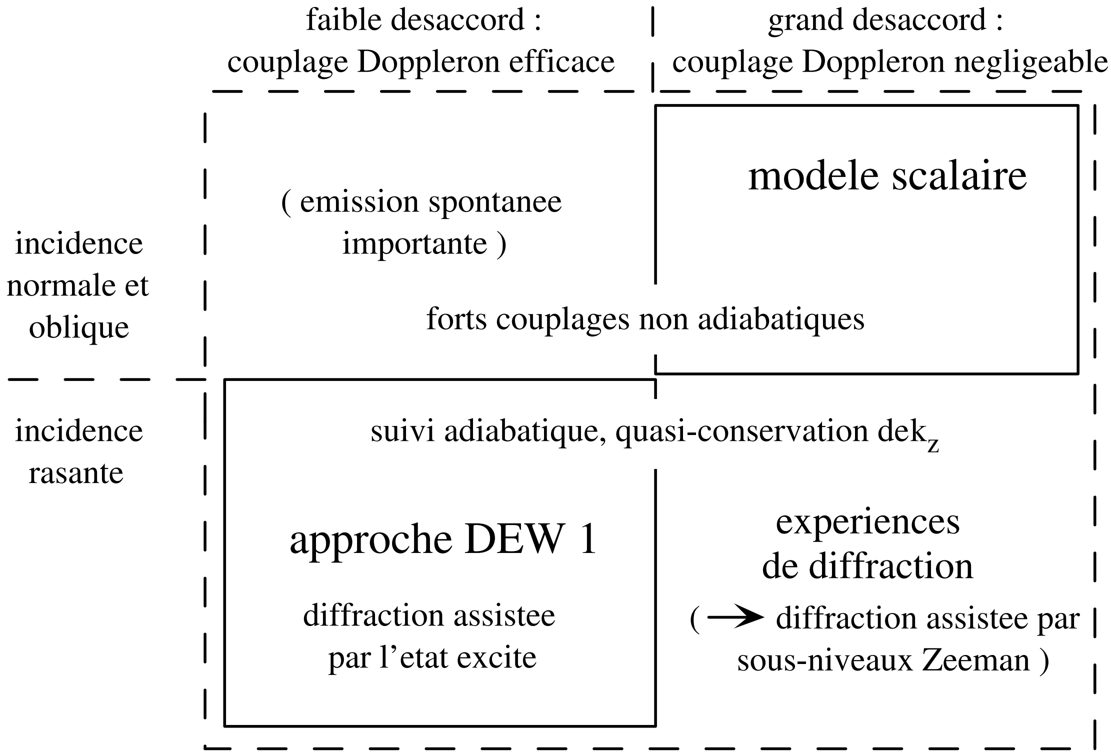

Figure 11.12: Comparaison entre l'approche DEW 1 et le modèle scalaire.
Partie gauche : désaccord comparable au décalage Doppler, partie droite : grand désaccord.
Partie supérieure : incidence normale ou oblique, avec des couplages non adiabatiques forts entre les niveaux adiabatiques de l'état fondamental ; partie inférieure : incidence rasante, suivi adiabatique assuré, sauf aux croisements évités.
Les expériences de Bonn et de Paris-Nord se situent en bas à droite.

évanescente, et ce sont eux qui sont responsables de la diffraction. Cependant, le formalisme du modèle DEW 1 n'est pas adapté pour calculer la figure de diffraction dans cette situation parce que les couplages non adiabatiques ne sont pas localisés dans des croisements évités.

11.1.4 Approches théoriques alternatives

Avant de comparer l'approche théorique du groupe de Bonn aux expériences de diffraction, passons en revue d'autres théories qui ont été développées pour la diffraction par l'onde évanescente stationnaire. Dans leur proposition originale [10], J. V. HAJNAL et G. I. OPAT reformulent les équations couplées (11.5) en une équation intégrale, qui est résolue numériquement par une méthode itérative. Comme pour le développement de BORN–VON NEUMANN, l'on peut s'attendre à ce que cette approche souffre de problèmes de convergence pour un champ lumineux fort, ce qui explique pourquoi elle n'a pas été reprise par le groupe de Bonn qui, lui, s'est intéressé au régime du couplage fort.

Le groupe de V. LORENT et de J. BAUDON qui a pu observer les résonances Doppleron dans l'onde évanescente [18], les a également interprétées théoriquement [99]. Cependant, pour tenir compte de l'émission spontanée, leur point de départ sont les équations de BLOCH optiques sans quantification du mouvement externe. Ceci empêche *a priori* de décrire la diffraction d'atomes. Par contre, cette théorie permet de comprendre les résonances Doppleron observées dans l'expérience [18] parce que la force dipolaire de l'onde évanescente est réduite autour de la condition de résonance du Doppleron. Les résonances Doppleron se manifestent alors par une réduction de la réflectivité de l'onde évanescente en fonction du désaccord.

L'approche des niveaux adiabatiques du modèle DEW 1 a été utilisée par J. E. MURPHY, L. HOLLENBERG et A. E. SMITH [101] pour interpréter les résultats numériques qu'ils ont obtenus en intégrant les équations d'ondes couplées, ainsi que pour expliquer les observations des résonances Doppleron [100] du groupe de H.-A. BACHOR. Dans ce point de vue, la réflectivité de l'onde évanescente est réduite si un croisement évité apparaît précisément à l'énergie incidente E_{zi} : l'atome passe alors adiabatiquement dans l'état excité qui est soumis à un potentiel attractif, et il est adsorbé à la surface du diélectrique.

Des approches «tout numériques» ont aussi été suivies par les groupes de D. WALLS [134] et de C. M. SAVAGE [80]. Dans ses résultats, D. WALLS s'est concentré sur une onde lumineuse stationnaire en géométrie de transmission, et sur les résonances Doppleron vers l'état excité final. Le groupe de C. M. SAVAGE a simulé les conditions de l'expérience du groupe de H.-A. BACHOR [100] et a trouvé un accord satisfaisant pour les résonances Doppleron. Il a également vérifié que l'intégration numérique reproduit les résultats de l'approche DEW 1 pour les paramètres choisis par R. DEUTSCHMANN et ses collègues. Par contre, il a constaté qu'il n'y a pas de diffraction pour les conditions expérimentales où le groupe de Bonn a effectivement observé la diffraction. Ce différend entre l'expérience et une approche théorique qui semble exacte (résolution numérique des équations d'ondes couplées) nous amène au paragraphe suivant, où nous allons étudier la théorie de DEW 1 dans le régime où la diffraction a été observée dans l'expérience.

11.1.5 Comparaison aux expériences de diffraction

Dans l'annexe 11.A, nous présentons de façon plus détaillée les conditions expérimentales dans lesquelles la diffraction d'atomes a été observée par les groupes de W. ERTMER [12], d'une part, et de V. LORENT [13], d'autre part. Nous allons nous contenter ici des conclusions suivantes : tout d'abord, dans les expériences, le désaccord Δ est beaucoup plus grand que le déplacement DOPPLER Δ_D, et le potentiel dipolaire de l'onde évanescente est suffisamment fort pour que l'atome reste dans une région où la saturation de la transition atomique est faible.

Ensuite, la longueur d'onde atomique incidente est très petite devant les échelles caractéristiques du réseau, de sorte que les expériences se placent dans le régime semi-classique. En particulier, les différences verticales $\Delta k_{z\nu}$ entre les vecteurs d'onde diffractés sont grandes devant la constante de décroissance κ, et l'approximation de BORN pour un potentiel dipolaire scalaire implique alors que les populations des ordres de diffraction non spéculaires sont négligeables. Notons finalement que du point de vue classique, l'onde évanescente stationnaire réalise un réseau de diffraction géométriquement épais, dont le contraste est relativement élevé (supérieur à $50\,\%$). Ceci implique que l'approximation du réseau de phase mince ne peut servir pour décrire ces expériences.

Sur le schéma 11.12, les expériences de diffraction se situent dans la partie en bas à droite. Elles correspondent donc à un régime de paramètres où les deux théories, l'approche DEW 1 ainsi que le modèle scalaire, prédisent que la diffraction est inefficace. Pour l'expérimentateur, le fait que la diffraction a pu être observée pour ces valeurs du désaccord est plutôt une bonne nouvelle, parce que la probabilité d'émission spontanée est alors négligeable. Pour le théoricien par contre, une autre théorie sera nécessaire pour expliquer les observations expérimentales.

Sur les figures 11.13 à 11.15, nous représentons les niveaux adiabatiques que l'on obtient dans le cadre de l'approche DEW 1 pour les paramètres utilisés dans les expériences. Sont également inclus les niveaux d'énergie donnés par l'approche perturbative pour le couplage Doppleron que nous avons esquissée au paragraphe 11.1.2. Sur la figure 11.13, nous constatons que dans l'expérience de Bonn, l'énergie incidente E_{zi} des atomes est près de la moitié du déplacement DOPPLER $\hbar\Delta_D$, et que les atomes atteignent a peine le premier croisement évité. Ce qui plus est, celui-ci ressemble plutôt à un croisement (voir aussi la figure 11.14, où la zone du croisement a été agrandie). Le couplage dû à la résonance Doppleron est en effet trop faible pour écarter les niveaux habillés. Ceci est en accord avec le calcul analytique représenté par le trait horizontal : il s'y confondent en fait deux traits dont la distance, infime, correspond à l'énergie de couplage C_l du Doppleron. En effet, il s'agit là d'un Doppleron d'ordre très élevé ($2l + 1 = 21$), qui induit un couplage beaucoup plus petit que les déplacements lumineux [voir (11.18)]

$$C_l(z_c) \simeq W_0^{(\mathrm{dia})}(z_c) \left(\frac{d\mathcal{E}}{\hbar\Delta} \, \mathrm{e}^{1-\kappa z_c} \right)^{19} \ll W_0^{(\mathrm{dia})}(z_c) \tag{11.22}$$

parce que $d\mathcal{E}_+ \, \mathrm{e}^{1-\kappa z_c}/\hbar\Delta \approx 0.3 < 1$. Ceci implique que le premier croisement évité que l'atome rencontre, correspond à une séparatrice avec une transmission très proche de 100% [voir le modèle de LANDAU–ZENER (11.15)], sauf dans une bande infime d'énergies incidentes autour de $E_{zi} = W_0^{(\mathrm{dia})}(z_c)$. Cette bande d'énergies correspond à des atomes qui rebroussent chemin à la position du croisement évité [$v_c = 0$ dans la formule (11.15)]. Dans les conditions expérimentales, la largeur de cette bande vaut $\delta E_{zi} \sim 10^{-20}\, E_{zi}$, elle est donc trop étroite pour être observée.

L'on obtient des résultats analogues pour l'expérience de Paris-Nord (voir la figure 11.15).

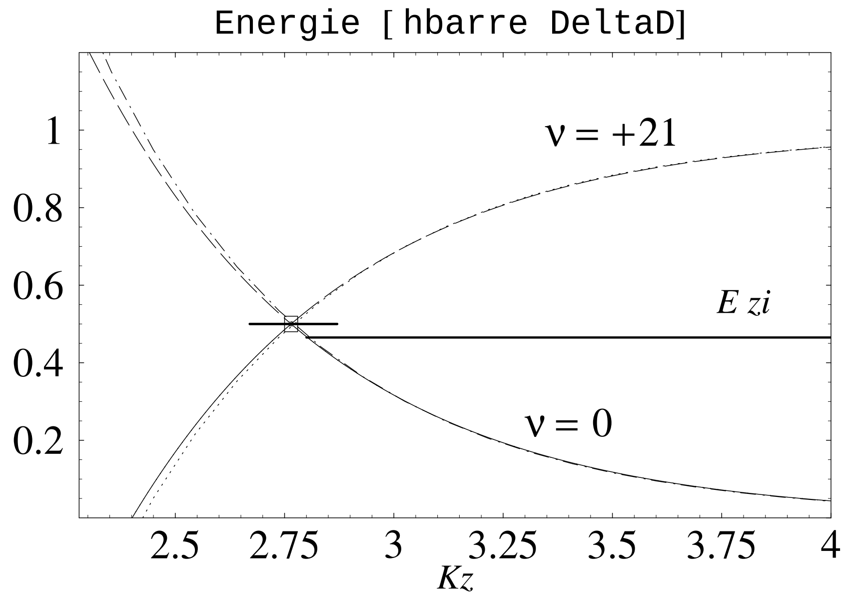

Figure 11.13: Potentiels adiabatiques pour les paramètres de l'expérience de Bonn. Les déplacements lumineux sont donnés en unités du déplacement DOPPLER $\hbar\Delta_D$*, la position en unités de la longueur de décroissance* $1/\kappa$ *de l'onde évanescente.*
En trait plein : potentiel adiabatique $W_0^{(\mathrm{ad})}(z)$*, en tirets :* $W_{21}^{(\mathrm{ad})}(z)$*, en point-tirets : résultat perturbatif pour le potentiel diabatique* $W_0^{(\mathrm{dia})}(z)$*, en pointillées :* $W_{21}^{(\mathrm{dia})}(z)$*. Le trait vertical marque le croisement de niveaux dans le calcul perturbatif. Le couplage Doppleron au croisement est trop faible pour que la différence en énergie dans le croisement évité soit visible dans la figure. Le rectangle autour du croisement évité est agrandi sur la figure 11.14.*
Paramètres : désaccord $\Delta = 20\,\Delta_D$*, énergies de couplage* $d\mathcal{E}_+ = 4.1\,\hbar\Delta_D$*,* $\mathcal{E}_- = 0.69\,\mathcal{E}_+$*, énergie incidente* $E_{zi} = 0.46\,\hbar\Delta_D\,(v_{zi} = 73\,\hbar\kappa/M)$*. Les potentiels adiabatiques ont été calculés numériquement en utilisant les états* $\nu = -40, \ldots +40$*. L'énergie de recul* E_q *a été négligée devant le déplacement* DOPPLER $\hbar\Delta_D$*.*

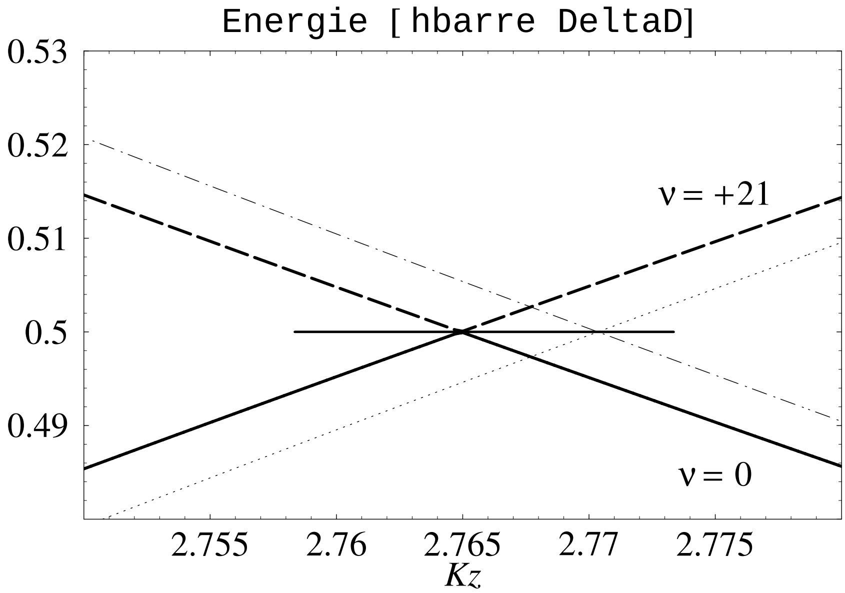

Figure 11.14: Agrandissement des potentiels adiabatiques pour l'expérience de Bonn autour du croisement des niveaux (le rectangle de la figure 11.13).

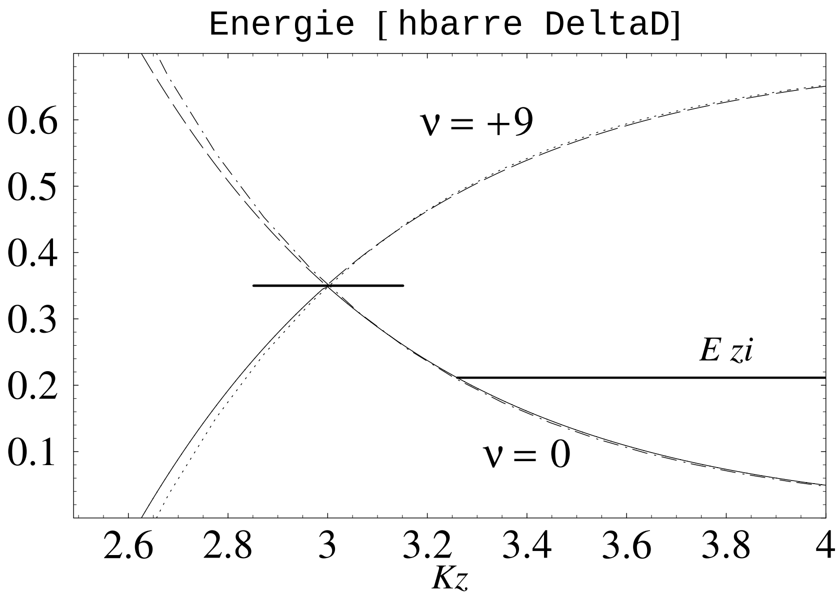

Figure 11.15: Potentiels adiabatiques pour l'expérience de Paris-Nord. Mêmes unités que pour la figure 11.13.
Paramètres : désaccord $\Delta = 8.3\,\Delta_D$, *énergies de couplage* $d\mathcal{E}_+ = 10\,\hbar\Delta_D$, $\mathcal{E}_- = 0.4\,\mathcal{E}_+$, *énergie incidente* $E_{zi} = 0.21\,\hbar\Delta_D$ $(v_{zi} = 160\,\hbar\kappa/M)$. *Les potentiels adiabatiques ont été calculés numériquement en utilisant les états* $\nu = -20, \ldots +20$. *L'énergie de recul* E_q *a été négligée devant le déplacement* DOPPLER $\hbar\Delta_D$.

11.1.6 Conclusion

Les niveaux adiabatiques de l'approche de DEW 1 permettent de comprendre les résonances Doppleron observées pour un désaccord de l'ordre de quelques déplacements DOPPLER Δ_D, dans un régime où l'émission spontanée joue un rôle important. Par contre, les observations de la diffraction d'atomes en incidence rasante faites à Bonn et à Paris-Nord restent inexpliquées parce que le désaccord est alors beaucoup plus grand que Δ_D, et que le couplage Doppleron aux croisements évités fait intervenir une transition à un nombre de photons très élevé. Par conséquent, la résonance Doppleron est trop faible pour amener l'atome à travers l'état excité vers un ordre de diffraction non spéculaire. Nous avons ainsi interprété les résultats numériques de D. GORDON et C. M. SAVAGE.

Les expériences de Bonn et de Paris-Nord se rapprochent donc d'une situation où l'état excité ne joue aucun rôle dans la diffraction. Cependant, si l'on adopte alors le modèle d'«atome à un niveau», en se restreignant à l'état fondamental, la théorie scalaire que nous avons développée au chapitre 7 dans l'approximation de BORN prédit elle aussi que l'efficacité de diffraction est extrèmement petite en incidence rasante. Nous avons constaté en utilisant l'image développée dans l'approche DEW 1, que cette coupure de l'efficacité de diffraction provient d'un suivi adiabatique de l'atome sur les niveaux d'énergie de l'état fondamental.

Dans la partie suivante de ce chapitre, nous présenterons une troisième approche qui nous semble la mieux adaptée pour expliquer les observations expérimentales de la diffraction d'atomes en incidence rasante.

11.2 La diffraction «assistée» par sous-niveaux magnétiques

Introduction

Nous montrons dans la deuxième partie de ce chapitre que c'est en tenant compte de la structure magnétique de l'état atomique fondamental qu'il est possible de comprendre les observations expérimentales de la diffraction en incidence rasante. En fait, les mêmes ingrédients ont déjà été utilisés par R. DEUTSCHMANN, W. ERTMER et H. WALLIS dans leur publication «*Reflection beam splitter for multilevel atoms*»[14], mais ils ont alors mis l'accent sur une onde évanescente simple, en la combinant à un champ magnétique. Ils ont montré que dans les potentiels adiabatiques pour les sous-niveaux magnétiques, des croisements évités apparaissent sous l'influence simultanée des champs lumineux et magnétique. Dans le même esprit que dans l'approche DEW 1, ces croisements évités agissent alors comme une séparatrice pour une onde atomique incidente. Par opposition à la théorie à deux niveaux, une grande valeur du désaccord n'empêche pas que les croisements évités des sous-niveaux magnétiques apparaissent

[14] *Physical Review A* **48**, R4023–26 (décembre 1993), réf. [79]

de façon efficace, avec l'avantage que la diffraction ne fait pas intervenir l'état excité et évite donc l'émission spontanée.

Dans la diffraction d'un atome avec une structure magnétique par une onde évanescente stationnaire, des croisements évités apparaissent aussi, même en absence d'un champ magnétique. Dans les croisements, l'atome peut changer d'état interne ce qui conduit à la diffraction dans un ordre non spéculaire. Ce mécanisme a été également observé par D. GORDON et C. M. SAVAGE de l'Université Nationale d'Australie (Canberra) à l'aide d'une solution numérique de l'équation de SCHRÖDINGER dépendante du temps (« *Evanescent wave diffraction of multi-level atoms* »[15]). Ils ont constaté que dans les conditions expérimentales de l'expérience de Bonn, la population de l'ordre de diffraction $\nu = -2$ peut atteindre jusqu'à $\sim 15\%$. Nous allons illustrer ce mécanisme de « diffraction assistée par sous-niveaux magnétiques » à l'aide d'un modèle simplifié qui permet des estimations analytiques de la population diffractée w_{-2}. Nous en donnerons en même temps une interprétation alternative en terme d'un interféromètre à effet STERN–GERLACH.

11.2.1 Présentation du modèle simplifié

Le champ lumineux

Considérons une onde évanescente stationnaire formée par une onde en polarisation p (ou « *TM* », champ magnétique perpendiculaire au plan d'incidence) et une onde en polarisation s (« *TE* », champ électrique perpendiculaire au plan d'incidence) se propageant en sens opposé. Le champ électrique $\vec{\mathcal{E}}(\mathbf{r})$ de l'onde évanescente s'écrit alors

$$\vec{\mathcal{E}}(\mathbf{r}) = [\mathcal{E}_p \mathbf{e}_p \, \exp \mathrm{i} q x + \mathcal{E}_s \mathbf{e}_s \, \exp\left(-\mathrm{i} q x\right)] \exp\left(-\kappa z\right), \tag{11.23}$$

où $\mathcal{E}_{p,s}$ sont les amplitudes des champs électriques à la surface du diélectrique et $\mathbf{e}_{p,s}$ leurs vecteurs de polarisation. En choisissant la direction du vecteur $\mathbf{e}_s$ (la direction Oy) comme axe de quantification, le vecteur de polarisation de l'onde p se décompose en composantes σ_+ et σ_-,

$$\mathbf{e}_p = \alpha_+ \mathbf{e}_+ + \alpha_- \mathbf{e}_- \equiv \frac{\kappa - q}{\sqrt{2} k_L} \mathbf{e}_+ + \frac{\kappa + q}{\sqrt{2} k_L} \mathbf{e}_-, \tag{11.24}$$

où les vecteurs unitaires $\mathbf{e}_\pm$ pour les polarisations $\sigma_\pm$ sont donnés par

$$\mathbf{e}_\pm \equiv \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_z \pm \mathrm{i} \mathbf{e}_x). \tag{11.25}$$

Nous allons supposer que le désaccord à résonance Δ est grand devant la fréquence de couplage $d\mathcal{E}_p/\hbar$, ainsi que devant le déplacement Doppler Δ_D. Rappelons que dans ce régime, la saturation de la transition atomique est faible et que nous pouvons nous

[15] *Optics Communications* **130**, 34–40 (15 septembre 1996), réf. [81] ; un « Erratum » est à paraître où les populations diffractées sont revues à la baisse par rapport à la première version de l'article.

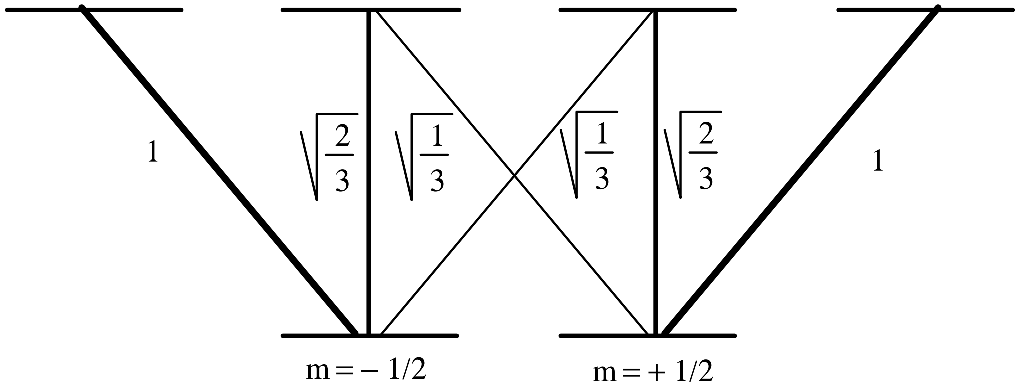

Figure 11.16: Coefficients de CLEBSCH–GORDAN *pour une transition* $J = 1/2 \rightarrow J_e = 3/2$.

restreindre à la multiplicité des sous-niveaux magnétiques $|m\rangle$ de l'état fondamental. Cette approche est justifiée par les conditions expérimentales.

En ce qui concerne la structure des sous-niveaux magnétiques, nous allons considérer une transition $J = 1/2 \rightarrow J_e = 3/2$. Les forces des transitions entre les sous-niveaux qu'excitent les composantes de polarisation de l'onde évanescente, sont alors caractérisées par les coefficients de CLEBSCH–GORDAN donnés sur la figure 11.16.

Remarque. Ce modèle simplifié diffère dans certains détails des travaux de R. DEUTSCHMANN et ses collègues ainsi que de ceux du groupe de C. M. SAVAGE : eux ont choisi la direction Oz comme axe de quantification ; ils ont inclus l'état excité avec sa multiplicité magnétique dans le calcul ; et la transition atomique est une transition $J = 2 \rightarrow J_e = 2$, ce qui correspond aux conditions de l'expérience de Bonn. (Dans l'expérience de Paris-Nord, une transition $J = 2 \rightarrow J_e = 3$ a été utilisée.) Pour notre part, nous avons choisi une description plus simple, ayant l'objectif plus modeste d'exposer le principe de la diffraction assistée par sous-niveaux magnétiques.

Le cas d'une onde évanescente progressive

Supposons d'abord que l'onde évanescente soit progressive et formée par la seule onde p. Nous constatons que les sous-niveaux $|+\rangle$ $(m = +1/2)$ et $|-\rangle$ $(m = -1/2)$ de l'état fondamental sont alors des états propres de l'opérateur du déplacement lumineux $\hat{\mathbf{V}}$ dont les valeurs propres $V_\pm(z)$ sont données par

$$V_+(z) = \frac{d^2\mathcal{E}_p^2}{\hbar\Delta}\left(|\alpha_+|^2 + \tfrac{1}{3}|\alpha_-|^2\right)\exp\left(-2\kappa z\right), \qquad (11.26\text{a})$$

$$V_-(z) = \frac{d^2\mathcal{E}_p^2}{\hbar\Delta}\left(\tfrac{1}{3}|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2\right)\exp\left(-2\kappa z\right). \qquad (11.26\text{b})$$

Ces déplacements lumineux sont représentés sur la figure 11.17 où nous voyons que l'état $|-\rangle$ est davantage déplacé que l'état $|+\rangle$. Ceci est la conséquence du fait que la

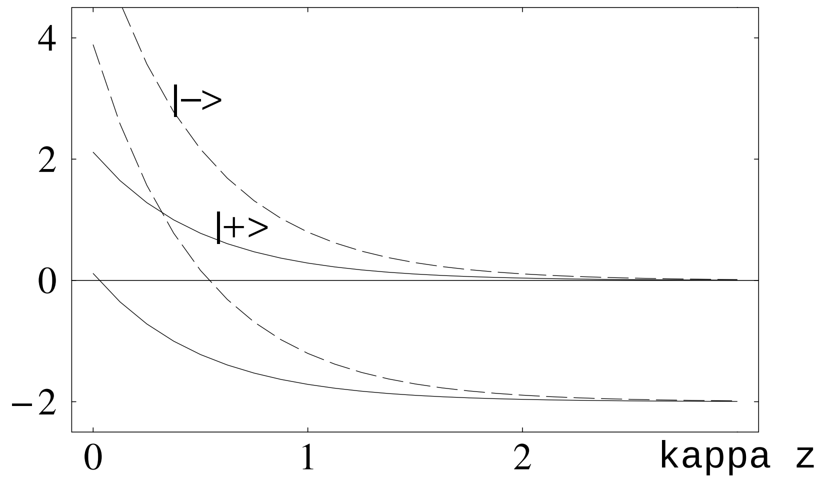

Figure 11.17: Déplacements lumineux des sous-niveaux magnétiques $|\pm,\nu\rangle$ pour une onde évanescente en polarisation p, en tenant compte de l'effet DOPPLER *(comparer à la figure 11.4). Les déplacements lumineux sont donnés en unités du déplacement* DOPPLER $\hbar\Delta_D$*, et la distance z en unités de $1/\kappa$.*
Paramètres : onde évanescente avec $q = \sqrt{2}k_L$, $\kappa = k_L$. Les déplacements lumineux à la surface du prisme sont déterminés par $d^2\mathcal{E}_p^2/\hbar\Delta = 2\,\hbar\Delta_D$.

composante σ_- de l'onde évanescente en polarisation p est plus forte que la composante σ_+ [voir (11.24)], et que le coefficient de CLEBSCH–GORDAN pour la polarisation σ_- est plus grand pour le sous-niveau $|-\rangle$ que pour le sous-niveau $|+\rangle$ (voir la figure 11.16).

Comme auparavant, nous décrivons le mouvement le long de la direction Ox dans une base d'onde planes avec les vecteurs d'ondes $k_{x\nu} = k_{xi} + \nu q$ (avec ν pair) que nous notons $|\pm,\nu\rangle$; l'énergie cinétique associée au vecteurs d'onde diffractés $k_{x\nu}$ implique que les paires de niveaux $|\pm,\nu\rangle$ sont séparées les unes des autres par $2\hbar\Delta_D$ (voir la figure 11.17). Les courbes de potentiel de cette figure correspondent aux potentiels diabatiques $W_\nu^{(\mathrm{dia})}(z)$ du sous-chapitre précédent (la figure 11.4). Pour une onde évanescente simple, ils ne sont pas couplés entre eux.

Le couplage RAMAN dans une onde évanescente stationnaire

Ajoutons maintenant une faible onde contra-propageante $\mathcal{E}_s$ avec la polarisation s, pour créer une onde évanescente stationnaire à faible contraste. Les sous-niveaux $|\pm,\nu\rangle$ sont alors couplés entre eux par des transitions RAMAN qui sont schématisées sur la figure 11.18. Ces transitions transfèrent des vecteurs d'onde $\pm 2q$ dans la direction Ox à l'onde atomique et couplent ainsi les ordres de diffraction. Elle sont caractérisées par des énergies de couplage qui correspondent aux éléments non diagonaux de l'opérateur du déplacement lumineux $\hat{\mathbf{V}}$. Par exemple, les transitions RAMAN

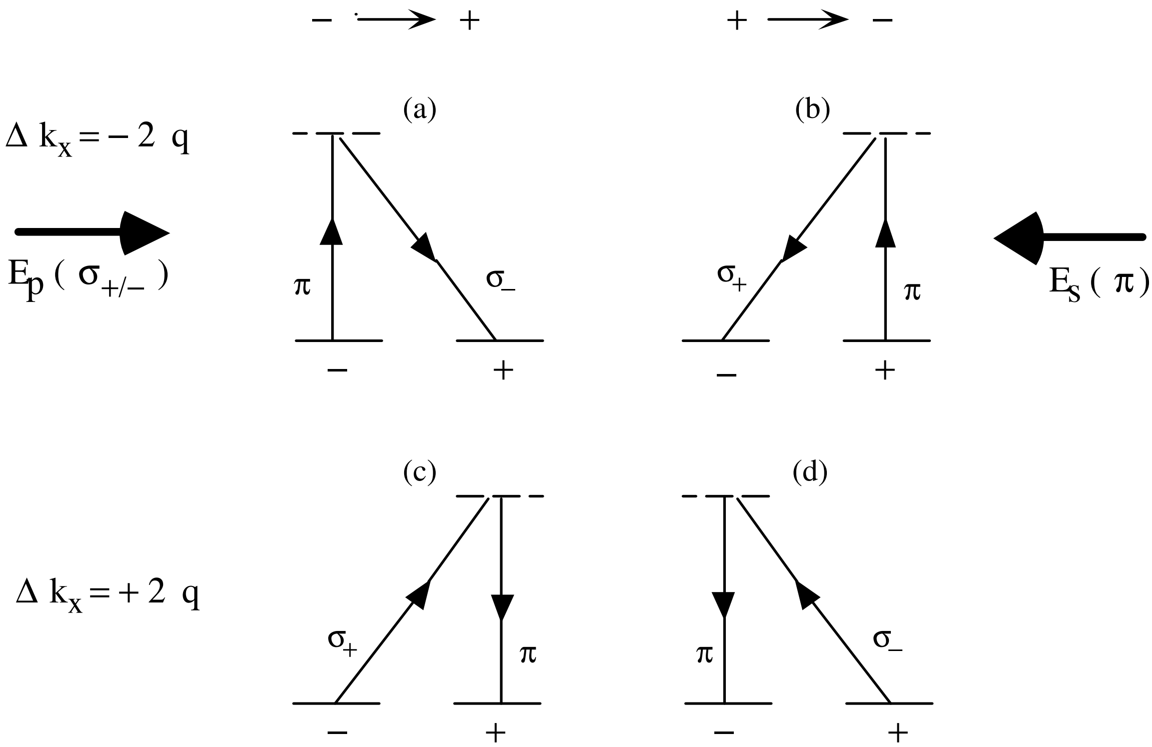

Figure 11.18: Transitions RAMAN *entre sous-niveaux magnétiques pour une transition $J = 1/2 \to J_e = 3/2$ dans l'onde évanescente stationnaire.*
(a,b) : l'atome absorbe d'abord un photon de l'onde contra-propageante $\mathcal{E}_s$ et en émet un autre dans l'onde co-propageante $\mathcal{E}_p$, ce qui conduit à un transfert de vecteur d'onde $\Delta k_x = -2q$. Dans le processus (a), l'atome émet un photon avec la polarisation σ_-, en passant du sous-niveau $|-\rangle$ vers le niveau $|+\rangle$. Le processus (b) fait intervenir l'émission d'un photon σ_+ et le changement inverse entre les sous-niveaux.
(c,d) : processus avec d'abord une absorption de l'onde co-propageante $\mathcal{E}_p$, et ensuite une émission dans l'onde contra-propageante $\mathcal{E}_s$, avec un transfert de vecteur d'onde $\Delta k_x = +2q$.

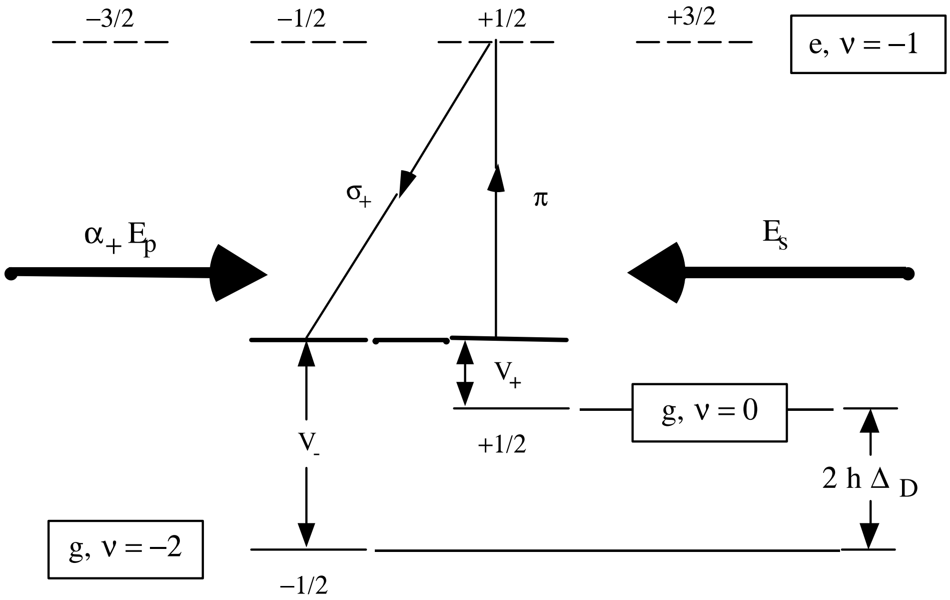

Figure 11.19: Transition RAMAN *résonnante entre sous-niveaux magnétiques dans l'onde évanescente stationnaire. La résonance apparaît lorsque la différence des déplacements lumineux $V_{\pm}(z)$ des états magnétiques $|\pm\rangle$ compense le décalage* DOPPLER $2\hbar\Delta_D$.

qui couplent les ordres de diffraction ν et $\nu - 2$ ont des couplages (les processus (a, b) sur la figure 11.18)

$$C^{(-)}_{-2}(z) \equiv \langle +, \nu - 2|\hat{\mathbf{V}}(z)|-, \nu\rangle \;=\; \frac{\sqrt{2}}{3}\frac{d^2}{\hbar\Delta}\alpha^*_{-}\mathcal{E}^*_p\mathcal{E}_s\,\mathrm{e}^{-2\kappa z} \qquad (11.27a)$$

$$C^{(+)}_{-2}(z) \equiv \langle -, \nu - 2|\hat{\mathbf{V}}(z)|+, \nu\rangle \;=\; \frac{\sqrt{2}}{3}\frac{d^2}{\hbar\Delta}\alpha^*_{+}\mathcal{E}^*_p\mathcal{E}_s\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}. \qquad (11.27b)$$

Le couplage $C^{(+)}_{-2}(z)$ (11.27b) correspond à une transition RAMAN où l'atome absorbe un photon en polarisation π de l'onde contra-propageante $\mathcal{E}_s$ et émet, de façon stimulée, un photon polarisé σ_+ dans l'onde co-propageante $\mathcal{E}_p$ (le processus (b) sur la figure 11.18). L'atome passe alors de l'état magnétique $|+\rangle$ vers l'état $|-\rangle$.

Nous notons qu'à la différence de l'approche DEW 1, les couplages entre les ordres de diffraction sont créés par une transition à deux photons [dans (11.27) intervient un produit de deux amplitudes $\mathcal{E}_{s,p}$ du champ lumineux]. Pour un grand désaccord, le couplage RAMAN est par conséquent plus efficace que le couplage Doppleron.

Dans la région asymptotique loin de l'onde évanescente, les transitions RAMAN sont désaccordées par rapport à la condition de résonance par le double $2\Delta_D$ du déplacement DOPPLER (voir la figure 11.19). Dans l'onde évanescente, elles deviennent résonnantes lorsque les différences des déplacements lumineux $V_{\pm}(z)$ des sous-niveaux magnétiques $|\pm\rangle$ compensent l'écart en énergie $2\hbar\Delta_D$. Ceci correspond aux croisements entre les potentiels diabatiques de la figure 11.20. Nous notons que

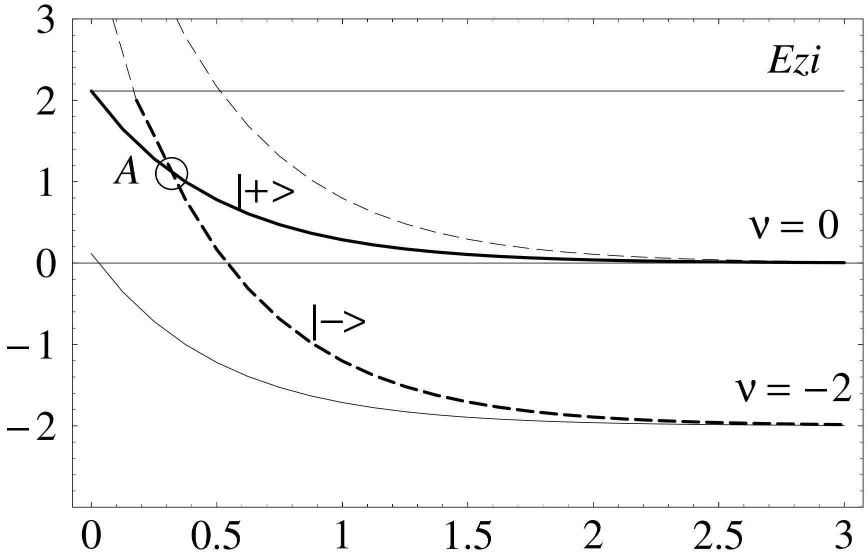

Figure 11.20: Trajectoires sur les niveaux diabatiques pour un atome incident dans l'état $|+, \nu = 0\rangle$ *et diffracté vers l'état* $|-, \nu = -2\rangle$.

les croisements ne sont possibles que parce que les niveaux $|\pm\rangle$ sont soumis à des déplacements différents. Comme dans l'approche DEW 1, le couplage RAMAN transforme les croisements des niveaux diabatiques en croisements évités, où l'atome peut passer sur une autre courbe de potentiel.

Par exemple, la transition qui relie les états $|+, \nu\rangle$ et $|-, \nu - 2\rangle$ (11.27b), devient résonnante à la position z_c fixée par

$$V_{-}(z_c) - V_{+}(z_c) = 2\hbar\Delta_D. \tag{11.28}$$

Par contre, le potentiel diabatique pour le niveau $|-, \nu\rangle$ se trouve toujours au-dessus de celui du niveau $|+, \nu - 2\rangle$ de sorte qu'ils ne se croisent pas et que le couplage RAMAN (11.27a) n'est jamais résonnant.

Pour modéliser la diffraction d'un atome incident dans l'état $|+\rangle$, nous pouvons donc nous limiter aux seuls états $|+, \nu = 0\rangle$ et $|-, \nu = -2\rangle$. Les potentiels diabatiques présentent un seul croisement évité (voir la figure 11.20), de sorte qu'il est possible de donner une expression analytique simple pour les populations w_0, w_{-2} des ordres de diffraction. Nous présentons deux calculs différents : un premier dans l'esprit de l'approche DEW 1, où nous décrivons le croisement évité par une transition non adiabatique à l'aide du modèle de LANDAU–ZENER ; et un deuxième à l'aide de l'approximation de BORN, où la diffraction sera interprétée par le principe de FRANCK–CONDON.

11.2.2 Résultats pour la population diffractée dans l'ordre -2

Calcul avec le modèle de LANDAU–ZENER

Pour caractériser le croisement évité des niveaux $|+,0\rangle$ et $|-,-2\rangle$ (à la position A sur la figure 11.20), utilisons le modèle de LANDAU–ZENER pour les transitions non adiabatiques : la transmission $T_{\rm LZ}$ de cette séparatrice atomique est alors donnée par (11.15)

$$T_{\rm LZ} = \exp\left(-\frac{\pi |C_{-2}^{(+)}(z_c)|^2}{2\hbar^2 \kappa \Delta_D v_c}\right), \tag{11.29}$$

où v_c est la vitesse de l'atome au croisement, et nous avons utilisé la variation exponentielle des niveaux diabatiques pour déterminer leurs gradients autour de la position z_c du croisement [voir (11.14)]. En suivant l'approche DEW 1, nous allons nous servir des fonctions d'onde semi-classiques (dans l'approximation BKW) en dehors du croisement évité. A la position du croisement, nous les raccordons par une matrice de transition de LANDAU–ZENER [voir l'équation (B5) de la référence [78]] aux ondes incidentes et diffractées. L'on obtient alors le résultat suivant pour les populations $w_{0,-2}$ des ordres de diffraction

$$\begin{aligned} w_0 &= 1 - 4\, T_{\rm LZ} R_{\rm LZ} \cos^2 \delta\varphi, \\ w_{-2} &= 4\, T_{\rm LZ} R_{\rm LZ} \cos^2 \delta\varphi, \end{aligned} \tag{11.30}$$

où $\delta\varphi$ est la différence de phase pour la propagation semi-classique de l'onde atomique entre la séparatrice et les points de rebroussement $z_{+,0}$ et $z_{-,-2}$ des potentiels associés aux états $|+,0\rangle$ et $|-,-2\rangle$. Dans l'approximation BKW, nous avons

$$\begin{aligned} \delta\varphi &= \frac{M}{\hbar} \int\limits_{z_{+,0}}^{z_c} v_{+,0}(z)\,{\rm d}z - \frac{M}{\hbar} \int\limits_{z_{-,-2}}^{z_c} v_{-,-2}(z)\,{\rm d}z \\ &= \frac{M v_{zi}}{\hbar\kappa} \operatorname{arctanh} \frac{v_c}{v_{zi}} - \frac{M v_{z,-2}}{\hbar\kappa} \operatorname{arctanh} \frac{v_c}{v_{z,-2}}, \end{aligned} \tag{11.31}$$

où à la deuxième ligne, nous avons utilisé le résultat analytique pour la phase BKW dans un potentiel exponentiel [l'équation (**Pha** 6) à l'annexe 3.A].

A cause de la différence de phase $\delta\varphi$, la population w_{-2} (11.30) présente des oscillations en fonction de la vitesse incidente v_{zi} que l'on appelle les *oscillations de* STÜCKELBERG. Par ailleurs, la population w_{-2} est proportionnelle au produit $T_{\rm LZ}\, R_{\rm LZ}$ parce que l'atome doit passer par la séparatrice en transmission à l'«aller» et en réflexion au «retour» (ou en ordre inverse). Sur la figure 11.21, nous représentons les populations w_0 et w_{-2} (11.30), en fonction de l'énergie incidente E_{zi}. Nous constatons que la population w_{-2} s'annule si l'énergie incidente E_{zi} est inférieure à la valeur $V_+(z_c)$ du déplacement lumineux au croisement évité. Ceci correspond au fait que d'un point de vue classique, l'atome n'atteint pas la position z_c du croisement où la transition RAMAN devient résonnante. Pour une énergie autour de $V_+(z_c)$, la population

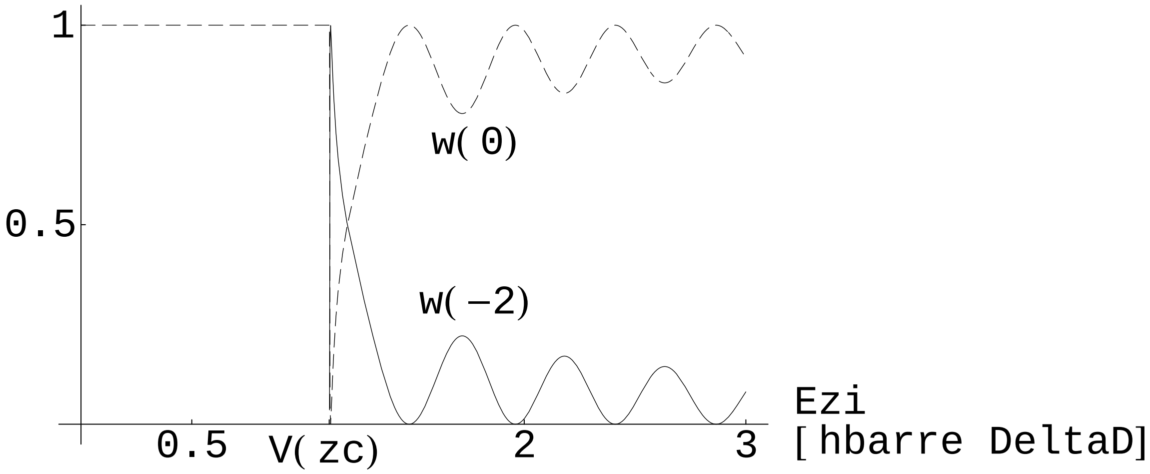

Figure 11.21: Résultat (11.30) pour la population de l'ordre de diffraction $\nu = -2$ dans le modèle de LANDAU–ZENER, *en fonction de l'énergie incidente E_{zi} (en unités de l'énergie* DOPPLER *$\hbar\Delta_D$). L'atome est incident dans l'état $|+, \nu = 0\rangle$ et diffracté vers l'état $|-, \nu = -2\rangle$.*
Trait plein (tirets): population w_{-2} (w_0). L'onde contra-propageante (polarisée s) a une amplitude $\mathcal{E}_s = 0.25\,\mathcal{E}_p$. Les paramètres pour l'onde évanescente sont identiques à ceux de la figure 11.17. Le croisement évité se trouve à l'énergie $V_+(z_c) \simeq 1.12\,\hbar\Delta_D$, ce qui correspond à une vitesse incidente $v_{zi} \simeq 47\,\hbar\kappa/M$ (nous avons pris $\hbar^2\kappa^2/2M = \hbar\Delta_D/2000$).

w_{-2} augmente brutalement et atteint jusqu'à $100\,\%$.[16] En fait, l'approche de LANDAU-ZENER n'est pas valable dans cette situation parce que l'atome rebrousse chemin à la position du croisement évité, de sorte que la vitesse v_c s'annule. Qualitativement, il est néanmoins vrai que l'atome est alors soumis pendant un temps long à la résonance RAMAN. Même une onde contra-propageante $\mathcal{E}_s$ faible conduit alors à un transfert efficace entre les potentiels diabatiques. Pour une énergie E_{zi} plus grande que $V_+(z_c)$, les oscillations de STÜCKELBERG apparaissent. Leur amplitude diminue lorsque l'énergie E_{zi} augmente parce que l'atome traverse le croisement évité avec une vitesse v_c plus grande et que la transmission T_{LZ} (11.29) augmente.

La singularité des populations autour du seuil $E_{zi} = V_+(z_c)$ provient du fait que la longueur d'onde atomique au croisement évité devient alors comparable à l'étendue spatiale du croisement ce qui rend caduque le calcul semi-classique qui conduit, dans l'approche de LANDAU–ZENER, à l'expression (11.29) pour la transmission T_{LZ}. Au paragraphe suivant, nous esquissons une approche complémentaire à la diffraction assistée par sous-niveaux magnétiques, où le couplage RAMAN est traité comme une perturbation à l'aide de l'approximation de BORN. Dans cette approche, la singularité des populations au seuil disparaîtra, mais nous serons limité à des valeurs faibles pour la population diffractée w_{-2}.

Calcul dans l'approximation de BORN

Nous considérons maintenant le couplage RAMAN $C_{-2}^{(+)}(z)$ (11.27b) comme une perturbation qui induit une transition de l'atome de l'état initial $|0,+\rangle$ vers l'état final $|-,-2\rangle$. Ces états sont caractérisés par les fonctions d'onde $\phi_{+,0}(z)$ et $\phi_{-,-2}(z)$ dans les potentiels diabatiques $V_+(z)$ et $V_-(z)$, avec des vecteurs d'onde asymptotiques donnés par k_{zi} et $k_{z,-2}$ (voir les fonctions d'onde sur la figure 11.22[17]).

Rappelons que dans l'approximation de BORN, la probabilité de transition entre les états initial et final est donnée par l'élément de matrice du couplage RAMAN entre les fonctions d'onde $\phi_{+,0}(z)$ et $\phi_{-,-2}(z)$ [l'équation (7.34) au chapitre 7]

$$w_{-2} = \frac{16M^2}{\hbar^4\, k_{zi}k_{z,-2}} \left|\langle\phi_{-,-2}(z)|\, C_{-2}^{(+)}(z)\, |\phi_{+,0}(z)\rangle\right|^2. \tag{11.32}$$

Nous donnons aux équations (11.B.4, 11.B.5) de l'annexe 11.B l'expression analytique pour l'élément de matrice dans (11.32). Nous nous contentons ici des observations suivantes : le recouvrement entre les fonctions d'onde $\phi_{+,0}(z)$ et $\phi_{-,-2}(z)$ passe par un maximum en fonction de l'énergie incidente E_{zi} lorsque leurs points de rebroussement classiques coïncident parce que l'amplitude de probabilité est grande à ces positions (voir la figure 11.22). Ceci correspond au *principe de* FRANCK–CONDON de la phy-

[16] La valeur $w_{-2} = 1$ correspond à $T_{\text{LZ}} = R_{\text{LZ}} = \frac{1}{2}$ et $\delta\varphi = 0\,(\text{mod}\,2\pi)$ dans (11.30).

[17] Sur la figure 11.22, au lieu de décaler les déplacements lumineux par lénergie DOPPLER $2\hbar\Delta_D$, nous avons dessinées les fonctions d'onde aux énergies $\hbar^2k_{z\nu}^2/2M$ qui correspondent aux vecteurs d'onde diffractés. Ceci permet de mieux visualiser l'intégrale sur z dans l'élément de matrice (11.32).

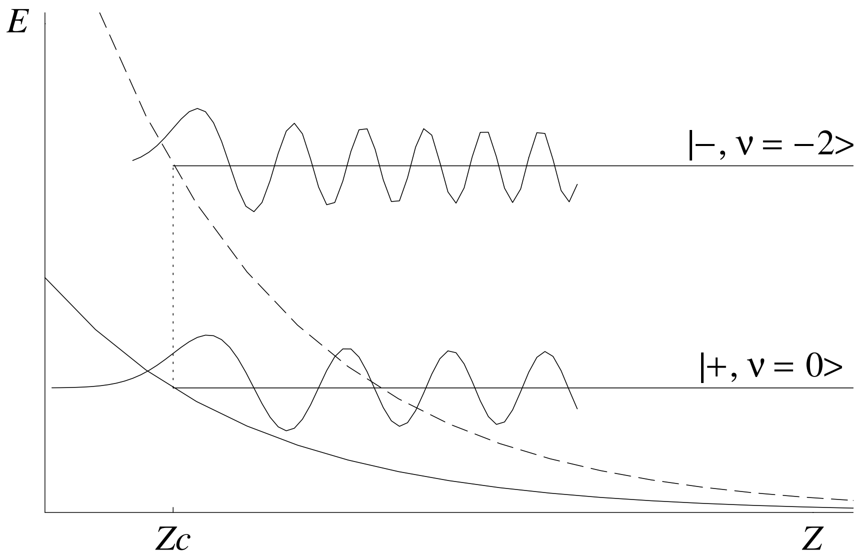

Figure 11.22: Illustration du principe de FRANCK–CONDON. *Le recouvrement des fonctions d'onde et donc l'efficacité de la diffraction est maximale lorsque coïncident les points de rebroussement dans les potentiels lumineux des états* $|+, \nu = 0\rangle$ *et* $|-, \nu = -2\rangle$*. Les fonctions d'onde de cette figure sont dessinées aux énergies qui correspondent aux vecteurs d'onde* k_{zi} *et* $k_{z,-2}$ *.*

sique moléculaire. Du point de vue des potentiels adiabatiques qui sont décalés l'un de l'autre par la différence en énergie $2\hbar\Delta_D$, la coïncidence des points de rebroussement des états $|+, 0\rangle$ et $|-, -2\rangle$ correspond à un croisement de niveaux à la hauteur de l'énergie incidente E_{zi}. Nous retrouvons là le maximum de la population diffractée w_{-2} de la figure 11.21.

Contrairement à l'approche de LANDAU–ZENER, le fait que la vitesse v_c s'annule au croisement ne pose pas de problèmes pour l'approximation de BORN, car celle-ci n'est pas limitée au régime semi-classique. Nous constatons sur la figure 11.23 que la population w_{-2} augmente de façon continue d'une valeur nulle dans la région $E_{zi} \ll V_+(z_c)$ (l'atome atteint alors le croisement évité seulement par l'effet tunnel), vers un maximum de l'ordre de $40\,\%$ pour $E_{zi} \approx V_+(z_c)$. Pour une énergie incidente au-dessus du seuil, l'approximation de BORN donne aussi lieu à des oscillations de STÜCKELBERG. Du point de vue du principe de FRANCK–CONDON, l'intégrale de recouvrement est alors dominée par la position où les fonctions d'onde ont la même longueur d'onde locale (la même vitesse classique).[18] Le résultat de l'intégration dépend alors de la phase relative des ondes atomiques à cette position, ce qui revient, dans le régime semi-classique, à la différence de phase $\delta\varphi$ (11.31). Nous constatons sur la figure 11.23 que la phase des oscillations de STUECKELBERG n'est pas la même dans l'approche de LANDAU–ZENER et dans l'approximation de BORN. Ceci provient du

[18]Cette position coïncide encore avec le croisement des niveaux diabatiques $V_+(z)$ et $V_-(z) - 2\hbar\Delta_D$.

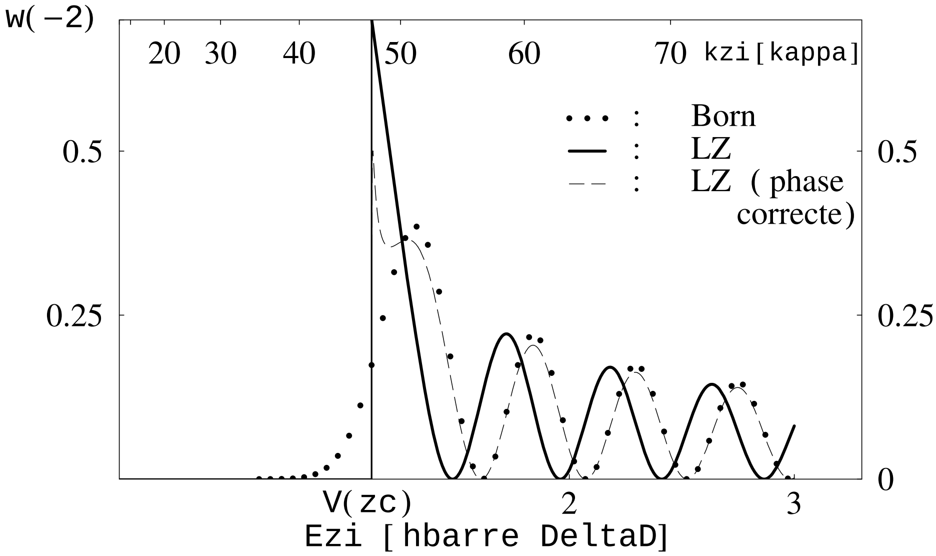

Figure 11.23: Résultat (11.32) pour la population de l'ordre de diffraction $\nu = -2$ dans l'approximation de BORN, *en fonction de l'énergie incidente E_{zi} (en unités de l'énergie* DOPPLER $\hbar\Delta_D$*). A comparer à la figure 11.21.*
Points : approximation de BORN, *trait plein : modèle de* LANDAU–ZENER *(11.30) pour le croisement évité, tirets : modèle de* LANDAU–ZENER *avec une correction pour la phase de l'amplitude de transmission. En haut de la figure, le vecteur d'onde incident k_{zi} en unités de κ.*
L'amplitude $\mathcal{E}_s$ de l'onde contra-propageante (polarisée s) vaut $\mathcal{E}_s = 0.25\,\mathcal{E}_p$. Les autres paramètres sont identiques à ceux des figures 11.17 et 11.21.

fait que dans le modèle de LANDAU–ZENER présenté ici, l'on néglige la phase associée à l'amplitude de transition dans le croisement évité (voir par exemple [137]). Pour obtenir la courbe en tirets sur la figure 11.23, nous avons ajouté un retard de phase[19] $-\pi/4$ à la différence de phase $\delta\varphi$ (11.31). Nous constatons qu'avec cette correction, le modèle de LANDAU-ZENER reproduit avec une précision excellente le résultat de l'approximation de BORN.

Pour finir, nous observons que le principe de FRANCK–CONDON (la coïncidence des points de rebroussement classiques) implique la condition suivante pour le maximum de l'efficacité de diffraction :

$$\frac{V_+}{V_-} = \frac{E_{zi}}{E_{zi} + 2\hbar\Delta_D}. \tag{11.33}$$

Cette condition est remarquable parce qu'elle relie des grandeurs physiques très différentes : le rapport au premier membre dépend seulement des composantes de po-

[19]Cette correction est en accord avec l'expression (2.11) de la référence [137], à la limite perturbative où la probabilité de transition non adiabatique est faible.

larisation de l'onde évanescente et de la structure magnétique de la transition atomique ; il est indépendant de la distance z parce que les déplacements lumineux $V_\pm(z)$ (11.26) varient tous les deux en $\mathrm{e}^{-2\kappa z}$. Le membre droit de (11.33), par contre, ne dépend que de la cinématique du jet atomique incident et du vecteur d'onde q des ondes évanescentes (dans le déplacement DOPPLER Δ_D), il est fixé par les vecteurs d'onde diffractés k_{zi} et $k_{z,-2}$.

Dans l'expérience, il serait donc intéressant d'ajuster le rapport V_+/V_- du membre gauche de (11.33) de façon à optimiser l'efficacité de la diffraction. A cet effet, l'on peut envisager de tourner le vecteur de polarisation du faisceau lumineux qui crée l'onde évanescente co-propageante : pour notre exemple d'une transition $J = 1/2 \to J_e = 3/2$, les déplacements lumineux varient de façon continue entre les cas limites d'une polarisation s ($V_\pm$ identiques) et d'une polarisation p [$V_\pm$ donnés par (11.26)]. Pour des moments cinétiques $J > 1/2$ apparaissent des différences encore plus grandes entre les potentiels lumineux des sous-niveaux magnétiques ce qui permet de remplir la condition (11.33) même si $2\hbar\Delta_D \gg E_{zi}$, donc pour un vecteur d'onde diffracté $k_{z,-2}$ beaucoup plus grand que k_{zi}. Une fois la condition (11.33) satisfaite, l'on peut ajuster la valeur du couplage RAMAN en faisant varier l'intensité de l'onde évanescente contra-propageante (avec une polarisation différente de l'onde co-propageante). Ceci permet d'optimiser les populations des ordres de diffraction pour réaliser, par exemple, une séparatrice « $50\,\%/50\,\%$ ».[20]

11.3 Conclusion et perspectives

Pour un atome à deux niveaux, la diffraction par l'onde évanescente stationnaire en incidence rasante n'est possible que grâce à l'assistance de l'état excité. Dans le modèle de R. DEUTSCHMANN, W. ERTMER et H. WALLIS [78], l'état excité est couplé à l'état fondamental par un processus à plusieurs photons, la résonance Doppleron. Ce processus devient résonnant dans l'onde évanescente lorsque les déplacements lumineux des états fondamental et excité compensent le désaccord par rapport à la condition de résonance du Doppleron. Du point de vue des potentiels adiabatiques, la résonance se manifeste à une position particulière comme un croisement évité. A cette position, l'approximation adiabatique n'est plus valable et l'onde atomique est séparée en deux de façon cohérente lors du passage à travers le croisement évité. Nous avons constaté que la transmission et la réflectivité de la première séparatrice que l'atome rencontre, peuvent être modélisées de façon satisfaisante par le modèle de LANDAU–ZENER pour les transitions non adiabatiques. L'onde évanescente stationnaire apparaît alors comme un ensemble de séparatrices et de miroirs : l'onde atomique le traverse en empruntant

[20] Pour estimer la valeur maximale de la population diffractée, nous pouvons prendre $T_{\mathrm{LZ}} = R_{\mathrm{LZ}} = \frac{1}{2}$ dans (11.30), et estimer $\delta\varphi = \pi/4$ le déphasage lorsque coïncident les points de rebroussement. L'on trouve alors une population $w_{-2} = 1/\sqrt{2} \approx 70\,\%$. Voir aussi les résultats de R. DEUTSCHMANN et collègues pour l'onde évanescente avec un champ magnétique [79], où un transfert de population de $80\,\%$ est possible.

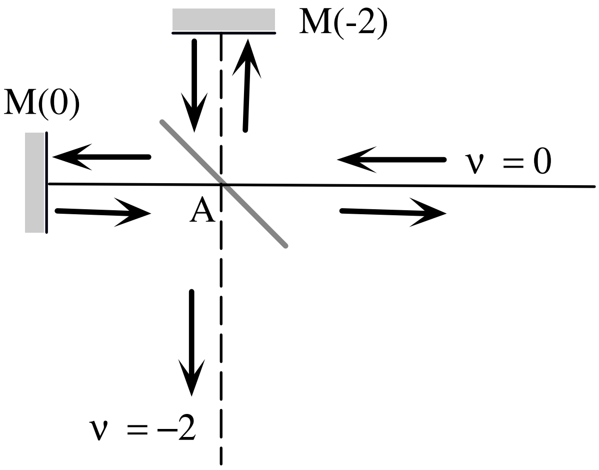

Figure 11.24: Interprétation de la diffraction à l'aide d'un interféromètre de MICHELSON. *L'onde atomique est separée en deux lors du premier passage par le croisement évité A. Les deux parties sont réfléchies aux miroirs $M(0)$ et $M(-2)$ qui correspondent aux deux ordres de diffraction. Les ondes se recombinent après la réflexion, et des franges d'interférence apparaissent dans les populations des ordres de diffraction.*

plusieurs chemins qui interfèrent entre eux pour créer la figure de diffraction.

Cependant, dans la limite d'un désaccord grand devant le déplacement DOPPLER, la résonance Doppleron fait intervenir un grand nombre de photons, et le couplage entre les états fondamental et excité est négligeable. Dans ce régime, qui correspond aux observations expérimentales, la diffraction d'atomes n'est possible que grâce à la structure magnétique de l'état fondamental atomique, comme l'ont observé R. DEUTSCHMANN, W. ERTMER et H. WALLIS [79], ainsi que D. GORDON et C. M. SAVAGE [81]. Des croisements évités apparaissent alors entre les déplacements lumineux des différents sous-niveaux magnétiques. Dans ces croisements, les sous-niveaux peuvent être couplés entre eux par une transition RAMAN qui devient résonnante lorsque la différence des déplacements lumineux compense le décalage DOPPLER. Ce mécanisme est efficace même à la limite d'un grand désaccord parce qu'il ne fait intervenir que des transitions à deux photons. Il prédit que la diffraction demande une onde évanescente avec un gradient de polarisation et que les atomes diffractés se trouvent dans des sous-niveaux magnétiques particuliers. En outre, les populations des ordres de diffraction peuvent être augmentées en utilisant un jet d'atomes préparés dans un état magnétique donné [81].

Nous avons constaté que du point de vue de l'approximation de BORN, l'efficacité de la diffraction est maximale lorsque les états incident et final ont le même point de rebroussement classique. Ce principe de FRANCK–CONDON permet de formuler une relation simple (11.33) entre les déplacements lumineux des sous-niveaux magnétiques, d'une part, et les composantes normales de l'énergie cinétique des ordres de diffraction, d'autre part.

Un interféromètre de MICHELSON atomique. Nous voudrions attirer l'attention sur l'analogie entre la diffraction assistée par les sous-niveaux magnétiques et un interféromètre atomique à effet STERN–GERLACH [138] : dans les deux cas en effet, la structure interne de l'atome permet de créer une superposition d'états internes qui suivent ensuite des trajectoires spatiales différentes. Nous pouvons alors nous représenter le processus de diffraction comme un interféromètre de MICHELSON (voir la figure 11.24, qui fait écho au schéma 11.7) : l'onde atomique est d'abord séparée par la séparatrice A, les deux parties sont ensuite réfléchies par des potentiels différents, pour se recombiner à la séparatrice lors du passage retour. Les deux voies de sortie de l'interféromètre correspondent aux ordres de diffraction $\nu = 0, -2$ dont les populations sont données par (11.30).

Dans cette image, les oscillations de STÜCKELBERG qui apparaissent en fonction de la différence de phase $\delta\varphi$, correspondent aux franges de l'interféromètre. En effet, lorsque l'on fait varier, par exemple, la longueur d'onde des atomes incidents, l'on change le «chemin atomique» qui est associé aux chemins $M(0)A$ et $M(-2)A$ représentés sur la figure 11.24. Cette interprétation suggère aussi que l'on puisse mesurer de façon interférométrique l'interaction de VAN DER WAALS. Celle-ci modifie les phases associées aux chemins $M(0)A$ et $M(-2)A$ parce que les «miroirs» (les points de rebroussement) $M(0)$ et $M(-2)$ se trouvent à des distances différentes de la surface du prisme et sont soumis à des valeurs différentes du potentiel de VAN DER WAALS. En faisant varier l'intensité de l'onde évanescente stationnaire, ces points de rebroussement se déplacent de sorte que la différence de phase $\delta\varphi$ est modifiée. L'on pourrait même envisager d'accéder à la partie quadrupolaire de l'interaction de VAN DER WAALS (pour un état fondamental avec $J > 1/2$) [92] parce que les deux bras de l'interféromètre correspondent à des sous-niveaux magnétiques différents.

Dépendance de l'intensité de l'onde évanescente. Dans l'expérience du groupe de Paris-Nord, l'on a observé une variation des populations diffractées avec l'intensité globale de l'onde évanescente stationnaire [13]. Cependant, dans l'hypothèse où tous les champs lumineux varient en $\mathrm{e}^{-\kappa z}$, les populations des ordres de diffraction ne dépendent pas de l'intensité de l'onde évanescente parce que un changement des amplitudes $\mathcal{E}$ du champ lumineux revient simplement à déplacer spatialement les potentiels lumineux. C'est seulement la présence de la surface du diélectrique qui peut introduire une dépendance de l'intensité lumineuse, soit parce que le potentiel dipolaire de l'onde évanescente est limité par la surface, soit à cause de l'interaction de VAN DER WAALS qui modifie la forme des potentiels diabatiques avec une autre dépendance fonctionnelle de la distance z.

La diffraction assistée par sous-niveaux magnétiques en incidence normale. Il est possible de «simuler» la diffraction d'atomes en incidence rasante dans une géométrie d'incidence normale. Il suffit à cet effet de créer dans le référentiel du laboratoire ce que l'atome voit dans son référentiel propre en incidence rasante : une onde

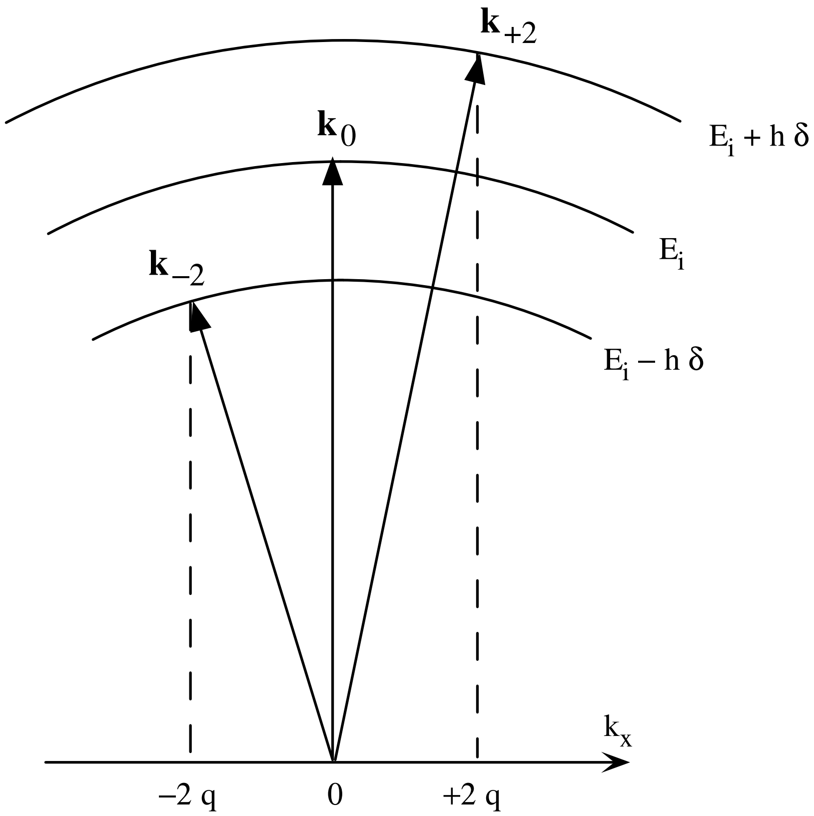

Figure 11.25: Vecteurs d'onde diffractés par une onde évanescente bi-chromatique.

évanescente stationnaire formée par deux ondes lumineuses dont les fréquences sont décalées par une fréquence $\delta = 2\Delta_D$ égale au double du décalage DOPPLER. Puisque le potentiel dipolaire de l'onde évanescente dépend alors explicitement du temps, la fréquence de l'onde atomique peut changer par des multiples entiers de δ : l'on peut donc transférer des énergies $n\hbar\delta$ (n entier) à l'atome réfléchi. Les autres composantes des vecteurs d'onde diffractés étant fixées par la symétrie de l'onde évanescente, ce transfert d'énergie augmente la composante normale du vecteur d'onde atomique (voir la figure 11.25). Comme dans la diffraction en incidence rasante, un transfert de vecteur d'onde du même ordre que le vecteur d'onde incident est possible si l'on utilise la structure magnétique de l'état fondamental. Des transferts beaucoup plus grands que le vecteur d'onde optique peuvent alors être réalisés dans le régime semi-classique.

Annexe

11.A Les expériences de diffraction d'atomes

Nous rassemblons ici les paramètres pertinents pour les expériences de diffraction d'atomes par une onde évanescente stationnaire en incidence rasante. Le dispositif expérimental est schématisé sur la figure 11.26. Nous allons nous limiter à deux publications où a été mise en évidence la séparation à grand angle d'un jet atomique, en accord avec la théorie cinématique de la diffraction :

1. la première observation a été présentée par le groupe de W. ERTMER, alors à l'Université de Bonn (Allemagne) [12], où l'on a utilisé un jet ralenti d'atomes de néon métastables ;

2. une deuxième observation, faite par le groupe de V. LORENT de l'Université de Paris-Nord à Villetaneuse [13], avec un jet thermique d'atomes de néon métastables. Le jet est incident en dehors du plan xOz du réseau de sorte que la composante de vitesse v_{xi} parallèle au pas du réseau est réduite par un facteur géométrique.

Pour alléger le texte, nous allons parler simplement des expériences de « Bonn » et de « Paris-Nord ».

11.A.1 Résultats expérimentaux

Dans l'expérience de Bonn, environ $70\,\%$ des atomes incidents sur la surface de l'onde évanescente sont détectés dans l'ordre de diffraction spéculaire ($\nu = 0$), et environ $1.5\ldots3\%$ dans l'ordre $\nu = -2$. Les populations de la figure de diffraction dépendent du désaccord Δ et passent par un maximum pour le désaccord donné au tableau 11.1. L'apparition du pic de diffraction dépend de façon critique du rapport des intensités I_-/I_+ des faisceaux qui forment l'onde évanescente stationnaire.

Dans l'expérience de Paris-Nord, les populations des ordres $\nu = 0$ et $\nu = -2$ valent $\simeq 60\%$ et $\simeq 40\%$, respectivement, pour les paramètres donnés aux tableaux. L'on a constaté que si l'intensité lumineuse est réduite de $25\,\%$, la fraction d'atomes diffractés diminue pour atteindre $\simeq 25\%$, au profit de l'ordre spéculaire, alors que la réflectivité totale reste approximativement inchangée.

11.A.2 Paramètres expérimentaux

Au tableau 11.1, nous donnons les valeurs pour le désaccord Δ et le déplacement DOPPLER Δ_D des expériences de Bonn et de Paris-Nord. Nous constatons que dans les deux expériences, Δ_D est petit par rapport au désaccord Δ.

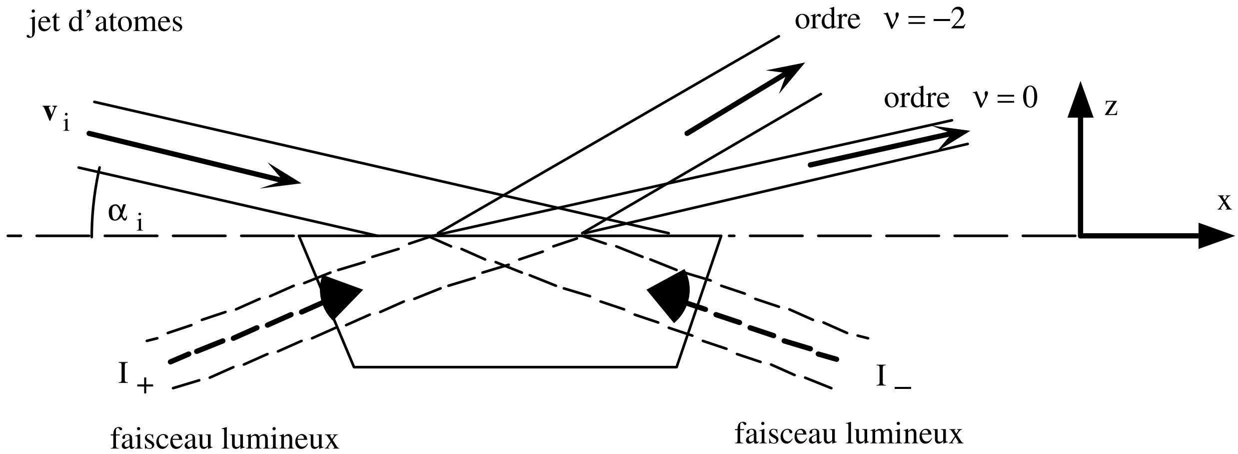

Figure 11.26: Schéma expérimental pour la diffraction d'atomes en incidence rasante.

Le tableau 11.1 montre également les intensités $I_\pm$ des faisceaux laser ainsi que le paramètre de saturation $s(z=0)$ à la surface du prisme, avec

$$s(z=0) = \frac{I_+ + I_-}{I_{\text{sat}}} \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + 4\Delta^2}. \tag{11.A.1}$$

Il restent des incertitudes sur ces quantités : d'une part, à cause des définitions des sections des faisceaux, et d'autre part, à cause de l'incertitude sur l'efficacité du système d'amplification de l'onde évanescente qui a été utilisé dans l'expérience de Paris-Nord. Nous obtenons une estimation alternative du paramètre de saturation en supposant que l'atome reste dans une partie de l'onde évanescente où la saturation de la transition atomique est faible de sorte que le potentiel dipolaire y prend la forme

$$V_{\text{dip}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar\Delta}{2} s(\mathbf{r}). \tag{11.A.2}$$

Si maintenant ce potentiel est suffisant pour assurer la réflexion des atomes, nous obtenons la valeur $s(z_{\text{reb}})$ du paramètre de saturation au point de rebroussement par

$$s(z_{\text{reb}}) \simeq \frac{2E_{zi}}{\hbar\Delta}. \tag{11.A.3}$$

Pour que ce raisonnement soit valable, il suffit que $s(z_{\text{reb}})$ soit petit devant l'unité. Les paramètres expérimentaux donnés au tableau 11.1 montrent que ceci est en effet le cas.

Les vecteurs d'onde diffractés

Au tableau 11.2, nous donnons les composantes de la vitesse incidente, en unité de la vitesse de recul. Ces nombres donnent également les rapports entre la longueur d'onde optique et la longueur d'onde de DE BROGLIE des atomes incidents. Nous

Quantité	Unité	Bonn	Paris-Nord
λ_L	nm	594	640
Γ	2π MHz	1.67	8.2
Γ	$\omega_{\rm rec}$	60	340
$1/\Gamma$	ns	95	19.2
$I_{\rm sat}$	mW/cm^2	1	4.1
Δ	Γ	540	200
Δ_D	Γ	27	24
I_+ $^{(a)}$	$I_{\rm sat}$	10^5	4.8×10^5
I_-/I_+		0.61	0.16
E_{zi}	$\hbar\Gamma$	12	5
$s(z=0)$		0.14	3.5
$s(z_{\rm reb})$		0.046	0.051
$\Gamma\tau_{\rm int}$		2.9	15

Tableau 11.1: Paramètres expérimentaux pour les expériences de diffraction d'atomes par les groupes de W. ERTMER *à l'Université de Bonn et de V.* LORENT *à l'Université de Paris-Nord.*

$^{(a)}$ *Pour l'expérience de Bonn, l'intensité lumineuse correspond à la puissance par section du faisceau. Pour l'expérience de Paris-Nord, nous nous sommes servi de la proportionnalité entre la puissance du faisceau lumineux incident, d'une part, et le paramètre de saturation $s(z = 0)$ à la surface du prisme, d'autre part (voir la référence [18]).*

Quantité	Unité	Bonn	Paris-Nord
$v_{\rm rec}$	cm/s	3.3	3.1
q	k_L	1.068	1.035
κ	k_L	0.37	0.27
v_i	$v_{\rm rec}$	760	25 000
α_i $^{(a)}$	mrad	36	1.6
k_{xi} $^{(b)}$	q	710	3 800
k_{zi}	κ	73	160
$k_{z,-2}$	κ	170	496
$k_{z,-4}$	κ	230	680
$k_{z,+2}$ $^{(c)}$	κ	136 i	440 i
β_{-2} $^{(d)}$		$\simeq 10^{-66}$	$\simeq 10^{-230}$

Tableau 11.2: Paramètres caractéristiques pour les vecteurs d'onde incidents et diffractés. Nous notons $v_i/v_{\rm rec} = \lambda_L/\lambda_{\rm dB} \gg 1$.

[a] *Angle d'incidence par rapport à la surface du prisme (voir la figure 11.26).*

[b] *Pour l'expérience de Bonn, le vecteur d'onde k_{xi} est égal au vecteur d'onde longitudinal k_i du faisceau atomique ; pour celle de Paris-Nord, le faisceau incident est tourné de $\phi_i \approx 81°$ par rapport au plan du réseau de sorte que $k_{xi} = k_i \cos\phi_i$.*

[c] *L'onde atomique diffractée dans l'ordre $\nu = +2$ est évanescente et ne contribue pas à la figure de diffraction.*

[d] *Facteur d'obliquité dans l'approximation de Born pour l'amplitude de diffraction dans l'ordre $\nu = -2$.*

Quantité	Bonn	Paris-Nord
q/κ	2.9	3.8
ξ	160	710
ϵ	0.97	0.69
$\omega_x^{\max}\tau_{\text{int}}$	$\simeq 23$	$\simeq 17$

Tableau 11.3: Paramètres caractéristiques pour le mouvement classique.

constatons que ces rapport sont très grands, la diffraction se situe donc dans le régime semi-classique.

En outre, les transferts de vecteur d'onde entre les ordres de diffraction sont grands devant la constante de décroissance κ. Par conséquent, le facteur d'obliquité $\beta(\Delta k_{z,-2}/\kappa)$ est extrèmement petit (voir au tableau 11.2). L'approximation de BORN prédit donc que les atomes sont réfléchis spéculairement, et que les populations non spéculaires sont pratiquement nulles.

Le mouvement classique

Nous rappelons que le mouvement classique dans l'onde évanescente est caractérisé, d'une part, par le nombre de périodes de l'onde évanescente stationnaire que traverse l'atome pendant le temps-type d'interaction τ_{int} le long de la trajectoire classique non perturbée. Ce nombre est de l'ordre du paramètre ξ que nous avons introduit au chapitre 6 à l'équation (6.13). Au tableau 11.3, nous constatons que ξ est grand dans les conditions expérimentales. Rappelons que ce régime caractérise l'incidence rasante du point de vue classique.

D'autre part, l'allure des trajectoires classiques dans l'onde évanescente stationnaire est différente pour un réseau géométriquement mince et épais. Ces régimes sont caractérisés par la valeur (petite ou grande) du paramètre $\omega_x^{\max}\tau_{\text{int}} = (q/\kappa)[2\epsilon/(1-\epsilon)]^{1/2}$ [voir l'équation (6.28)] : dans un réseau géométriquement épais et en incidence normale, l'atome oscille plusieurs fois avec un fréquence angulaire $\omega_x \leq \omega_x^{\max}$ dans les «vallées du potentiel» pendant le temps τ_{int} de réflexion. Le tableau 11.3 montre que les expériences de diffraction se situent dans le régime du réseau géométriquement épais. Nous en concluons que le calcul perturbatif classique introduit au chapitre 6 n'est pas valable, il peut tout au plus donner des indications qualitatives. En outre, l'approximation du réseau de phase mince n'est pas valable, elle non plus, parce qu'elle est basée sur la même approche perturbative.

11.B Eléménts de matrice du potentiel exponentiel (III)

Nous donnons dans cette annexe l'expression analytique pour l'élément de matrice qui intervient dans la population w_{-2} (11.32) de l'ordre de diffraction $|-, \nu = -2\rangle$, pour un atome incident dans l'état $|+, \nu = 0\rangle$.

En fait, nous avons déjà calculé l'intégrale correspondante dans l'annexe 9.A.1 avec le résultat (9.A.9). Pour la diffraction assistée par sous-niveaux magnétiques, nous trouvons alors l'expression suivante pour l'élément de matrice dans (11.32) :

$$\begin{aligned}
&\frac{2M}{\hbar^2}\,\langle\phi_{-,-2}(z)|\,C_{-2}^{(+)}(z)\,|\phi_{+,0}(z)\rangle = \qquad\qquad (11.B.4)\\
&\qquad \frac{C_{-2}^{(+)}(z=0)}{2V_-(z=0)}\sqrt{k_{z,-2}k_{zi}}\frac{k_{z,-2}+k_{zi}}{2\kappa}\beta(\Delta k_{z,-2}/\kappa)\left(\frac{V_+(z=0)}{V_-(z=0)}\right)^{\mathrm{i}k_{zi}/2\kappa}\times\\
&\qquad \times\,{}_2F_1\left[1-\mathrm{i}\frac{k_{z,-2}-k_{zi}}{2\kappa},1+\mathrm{i}\frac{k_{z,-2}+k_{zi}}{2\kappa}\,;2\,;1-\frac{V_+(z=0)}{V_-(z=0)}\right],
\end{aligned}$$

qui est valable dans la limite semi-classique $k_{zi}, k_{z,-2} \gg \kappa$, et où ${}_2F_1$ est la fonction hypergéométrique définie en (9.A.8). La population w_{-2} (11.32) de l'ordre de diffraction $|-, \nu = -2\rangle$ est donc donnée par

$$w_{-2} = \left(\frac{C_{-2}^{(+)}(z=0)}{V_-(z=0)}\frac{k_{z,-2}+k_{zi}}{2\kappa}\beta(\Delta k_{z,-2}/\kappa)\right)^2 |\,{}_2F_1|^2\,, \qquad (11.B.5)$$

où ${}_2F_1$ est la fonction hypergéométrique dans (11.B.4).

Chapitre 12

La diffraction d'atomes par un miroir modulé dans le temps

Présentation

Nous reproduisons en annexe de ce chapitre l'article «*A modulated mirror for atomic interferometry*» par C. H., A. M. STEANE, R. KAISER et J. DALIBARD, paru dans le *Journal de Physique II (France)* **4**, pp. 1877–96 (novembre 1994). Nous y étudions la réflexion d'atomes par un miroir à onde évanescente dont le potentiel dipolaire est modulé dans le temps.

Ce système présente une analogie étroite à la diffraction par une onde évanescente stationnaire, le temps jouant le rôle de la coordonnée horizontale x. Aux transferts de vecteur d'onde $2nq$ dus à la périodicité spatiale de l'onde évanescente stationnaire (avec une période π/q), correspondent alors des transferts de fréquence $n\omega$ où $2\pi/\omega$ est la période de modulation du potentiel. A cause de la conservation de l'énergie ou, ce qui revient au même, de la relation de dispersion de l'onde atomique, les ondes atomiques diffractées ont un vecteur d'onde avec des composantes différentes dans la direction perpendiculaire au miroir. La diffraction par le miroir modulé peut alors servir de séparatrice qui crée une superposition cohérente d'états externes différents. Au § 6 de cet article seront évoqués deux interféromètres atomiques pour des atomes qui tombent dans le champ de pesanteur et qui sont réfléchis et diffractés plusieurs fois par le miroir modulé. Le seul élement optique dans ces interféromètres est le miroir modulé qui sert à la fois à séparer et à recombiner les ondes atomiques.

Dans l'article en annexe, les populations des ordres de diffraction seront calculées pour un atome à un niveau, à l'aide de l'approximation de BORN (§ 3), de l'approximation du réseau de phase mince (§ 4), ainsi qu'en résolvant numériquement l'équation de SCHRÖDINGER dépendante du temps (§ 5). Les domaines de validité des différentes approches sont identifiés ; nous en comparons les résultats qui se trouvent en bon accord dans leurs domaines de validité respectifs. A l'équation (4.10) du § 4, le lecteur trouvera une démonstration alternative de la formule du déphasage de l'approximation du réseau de phase mince [l'équation (8.45) dans ce mémoire], cette fois-ci à partir de l'équation de SCHÖDINGER. Dans l'approximation du réseau de phase mince, la diffraction des atomes est due à une modulation de phase (temporelle) de l'onde atomique réfléchie, qui présente alors des bandes latérales. Nous constaterons de nouveau que la diffraction n'est efficace que si les transferts de vecteurs d'onde Δk_z entre les bandes latérales sont au plus de l'ordre de la constante de décroissance κ de l'onde évanescente. Nous montrons une formulation équivalente de ce résultat : la modulation de phase est inefficace si l'atome subit un grand nombre de périodes de modulation pendant le temps d'interaction. L'inverse du temps d'interaction définit donc la «bande passante» du miroir modulé.

Ajoutons encore que la diffraction d'une onde de matière par un potentiel modulé dans le temps a été étudiée aussi dans le domaine des neutrons. L'idée d'un miroir modulé a été proposée par D. L. HAAVIG et R. REIFENBERGER en 1982 [139], et un interféromètre à trois réseaux de diffraction temporels a été étudié par R. GOLUB et S. K. LAMOUREAUX [140]. J. FELBER du groupe de R. GOLUB a présenté une étude théorique et expérimentale de la diffraction d'une onde neutronique par une marche de potentiel dont la position est modulée [141] ; il a en particulier développé une approximation qui permet d'aller au-delà du spectre symétrique de la modulation de phase que l'on trouve dans l'approximation du réseau de phase mince.

Du côté de la diffraction d'atomes dans le temps, le groupe de J. DALIBARD du Laboratoire KASTLER–BROSSEL de l'Ecole Normale Supérieure à Paris a pu obtenir des résultats expérimentaux suite à la proposition théorique du miroir modulé : la modulation de phase de l'onde atomique réfléchie a été observée en décembre 1994 [14], et en février 1996, un interféromètre atomique a été mis en évidence, où l'atome est réfléchi trois fois par le miroir [85]. Dans la première de ces expériences, les populations des bandes latérales présentent un accord satisfaisant avec une solution numérique de l'équation de SCHRÖDINGER scalaire pour un potentiel exponentiel modulé. Un écart apparaît néanmoins pour des hautes fréquences de modulation, de l'ordre de quelques $1/\tau_{\rm int}$ ($\tau_{\rm int}$ est le temps d'interaction) ; la modulation de phase a été trouvée plus efficace que prévu par la théorie. Cet écart a été attribué à l'interaction de VAN DER WAALS et à la présence de la surface du diélectrique qui introduisent des échelles de temps plus courtes dans la dynamique classique de l'atome, et donc une bande passante plus élevée.

Notons finalement que la diffraction d'une onde de matière par un miroir modulé représente une vérification de l'équation de SCHRÖDINGER dépendante du temps [140, 85], et qu'elle ouvre la possibilité de mesures de précision parce que parmi toutes les grandeurs physiques, une fréquence peut être synthétisée aujourd'hui avec la plus grande précision.

Annexe

12.A *A modulated mirror for atomic interferometry*

Une version électronique de ce papier est accessible sur arxiv.org/quant-ph/0408156.

Conclusion de la seconde partie

Dans le régime de faible saturation, le mouvement d'un atome à deux niveaux dans une onde évanescente stationnaire est déterminé par le potentiel dipolaire scalaire. Ce réseau de diffraction en réflexion permet de réaliser un nombre de régimes différents pour la diffraction d'une onde atomique : d'une part, suivant la géométrie du réseau, son épaisseur et son contraste, et d'autre part, suivant les propriétés cinématiques des atomes incidents, leur angle d'incidence et leur longueur d'onde.

Le régime semi-classique

Les expériences de diffraction actuelles se situent dans le régime semi-classique de la diffraction où la longueur d'onde de DE BROGLIE est très petite par rapport aux échelles spatiales de l'onde évanescente. Plus précisément, nous avons constaté que bien que la longueur d'onde atomique locale varie dans l'onde évanescente stationnaire, c'est la longueur d'onde des atomes *incidents* qui est pertinente pour définir le régime semi-classique. Ce régime diffère des réseaux de diffraction que l'on rencontre habituellement en optique lumineuse, où l'indice de réfraction est ou bien constant, ou bien il varie rapidement à l'échelle de la longueur d'onde optique. La diffraction d'atomes se rapproche donc plutôt de l'optique géométrique dans un milieu avec un indice lentement variable.

Dans le régime semi-classique, la diffraction d'atomes présente plusieurs propriétés caractéristiques. Du point de vue de la théorie cinématique, les angles de diffraction sont généralement petits parce que le vecteur d'onde incident est grand devant les transferts de vecteur d'onde que l'atome reçoit du réseau de diffraction.

Pour les populations des ordres de diffraction, le régime semi-classique implique également qu'en incidence normale, une onde évanescente stationnaire avec un contraste faible peut créer une figure de diffraction avec plusieurs ordres non spéculaires (voir au paragraphe 7.3). Nous avons interprété cette sensibilité de la diffraction par la réflexion de l'onde atomique sur une surface ondulée, formée par les points de rebroussement classiques. L'amplitude de modulation de la surface de rebroussement est une fraction de la longueur de décroissance de l'onde évanescente, et la diffraction est forte lorsque cette amplitude devient du même ordre que la longueur d'onde des atomes incidents. L'onde de DE BROGLIE réfléchie par le réseau présente alors une forte modulation de phase.

En incidence oblique ou rasante, l'épaisseur non nulle du réseau implique que dans la diffraction au premier ordre, la composante normale du vecteur d'onde atomique est quasiment conservée, à la constante de décroissance κ de l'onde évanescente près. Dans le régime semi-classique, cette loi de conservation approchée a pour conséquence que la diffraction devient inefficace en incidence oblique, et qu'elle est impossible en incidence rasante. D'autre part, la quasi-conservation du vecteur d'onde normal permet de réaliser la diffraction de BRAGG d'une onde atomique en réflexion si le réseau est épais. Dans ce régime, l'onde atomique incidente est en effet couplée de façon résonnante à une seule onde diffractée avec la même composante normale de vecteur d'onde. Cependant, pour que le couplage aux autres ondes diffractées soit négligeable, il est nécessaire que l'épaisseur du réseau soit beaucoup plus grande que sa période ce qui rend difficile une réalisation expérimentale de la diffraction de BRAGG.

Nous avons montré que dans le régime semi-classique, la figure de diffraction peut être calculée avec l'approximation du réseau de phase mince. Cette approche est inspirée de l'optique géométrique, où l'on calcule la phase du champ lumineux le long des rayons géométriques. Nous l'avons identifiée comme une généralisation de l'approximation de RAMAN–NATH qui est généralement utilisée pour des réseaux de diffraction en transmission. Bien que l'atome ralentisse et rebrousse chemin dans l'onde évanescente de sorte que sa longueur d'onde augmente, les trajectoires classiques sont un outil précieux pour déterminer la modulation de phase de l'onde atomique réfléchie par l'onde évanescente stationnaire. Nous avons montré que la phase de l'onde réfléchie peut être calculée en accumulant le potentiel dipolaire de l'onde évanescente stationnaire le long des trajectoires que l'atome suivrait lors de la réflexion par une onde évanescente simple. La figure de diffraction est alors donnée par la transformée de FOURIER de l'onde atomique déphasée. L'approximation du réseau de phase mince permet de caractériser la diffraction au-delà du régime perturbatif, où les populations des ordres élevés sont notables. Dans cette situation, la figure de diffraction suit à peu près la distribution de vitesse pour une particule classique et présente des «arc-en-ciels» aux valeurs maximales du transfert de vitesse classique. D'un point de vue plus général, l'approximation du réseau de phase mince permet de calculer des déphasages dus à des potentiels qui perturbent peu ou pas du tout la trajectoire atomique. L'on rencontre de tels potentiels fréquemment dans l'interférométrie atomique.

D'autres régimes

Nous avons également étudié la diffraction d'atomes dans le régime quantique où la longueur d'onde de BROGLIE est beaucoup plus grande que l'épaisseur de l'onde évanescente. L'on se rapproche alors d'un réseau de diffraction optique, comme par exemple une surface métallique ondulée. En particulier, la diffraction est efficace quelque soit l'angle d'incidence.

Finalement, pour expliquer les observations expérimentales de la diffraction en incidence rasante, le modèle d'atome à un niveau (et même à deux niveaux) n'est pas suffisant. Il faut alors prendre en compte la multiplicité des sous-niveaux magnétiques de l'état fondamental atomique, ainsi que la structure en polarisation de l'onde évanescente stationnaire. Dans une approche semi-classique, l'on a alors affaire à des trajectoires sur les potentiels différents associés aux sous-niveaux magnétiques et à des transitions entre ces potentiels. La diffraction n'est possible que parce que la différence entre les énergies internes des sous-niveaux crée une transition résonnante qui permet la conversion d'énergie potentielle en énergie cinétique. Dans ce point de vue, la diffraction s'apparente à l'effet STERN–GERLACH dans la mesure que les états internes sont associés à des trajectoires classiques différentes.

Perspectives

C'est un résultat un peu surprenant que ce soit seulement la diffraction assistée par sous-niveaux magnétiques qui rende possible de grands transferts de vitesse (beaucoup plus grands que la vitesse de recul) dans la direction normale au miroir. Il est également intéressant d'étudier ce mécanisme en incidence normale ou oblique, en utilisant une onde évanescente bi-chromatique. La structure magnétique de l'état fondamental atomique permet alors d'augmenter considérablement la bande passante pour les transferts d'énergie, en comparant à un miroir vibrant scalaire.

En ce qui concerne le mouvement classique d'un atome à un niveau dans l'onde évanescente stationnaire, nous nous sommes limité dans ce mémoire à un réseau géométriquement mince. Cependant, les équations du mouvement classiques ont la structure d'un oscillateur non linéaire piloté ce qui permet d'envisager un mouvement chaotique pendant la réflexion. Cette observation promet également des conséquences curieuses pour la théorie quantique.

Troisième partie

Réflexion diffuse d'atomes par le miroir à onde évanescente

Introduction à la troisième partie

Quand une onde est incidente sur un miroir de bonne qualité, une grande fraction de son intensité est réfléchie dans la direction spéculaire fixée par la loi de SNELL–DESCARTES. Le miroir à atomes permet effectivement de réfléchir cent pour cent des atomes incidents à condition que les atomes soient suffisamment lents et que la barrière de potentiel du miroir soit suffisamment élevée. La spécularité de la réflexion est le sujet de cette partie du présent mémoire, que constituent les chapitres 13 à 17. Ce problème a un intérêt immédiat si le miroir fait partie d'un système d'imagerie ou encore d'un interféromètre atomique : d'une part, la fraction d'atomes qui sont réfléchis de façon diffuse, ainsi que leur divergence angulaire, déterminent la taille de la tâche focale que l'on peut réaliser en imagerie, même avant la limite de diffraction ; d'autre part, la réflexion diffuse réduit le contraste des franges d'interférence dans un interféromètre parce que les ondes atomiques diffusées ont des phases aléatoires. Notre étude contribue donc à évaluer la « qualité optique » du miroir à atomes. En particulier, nous allons établir les contraintes auxquelles sont sujettes les composants du miroir pour que celui-ci soit un élément utile de l'optique atomique.

Par rapport à l'optique lumineuse, nous constatons tout d'abord que l'optique atomique impose des critères plus sévères à ses composants, simplement parce que la longueur d'onde atomique est généralement beaucoup plus petite que la longueur d'onde optique. Ceci augmente considérablement la sensibilité de l'onde atomique aux irrégularités dans la « surface » du miroir. Mais comment le miroir à onde évanescente peut-il présenter des irrégularités ? La barrière de potentiel du miroir écrante la surface du diélectrique au-dessus de laquelle se propage l'onde évanescente, et bien que la surface puisse être rugueuse à l'échelle de la longueur d'onde atomique, les atomes n'interagissent pas directement avec elle. C'est seulement à travers un médiateur qu'une interaction entre l'atome et la surface rugueuse peut se produire. Dans cette partie, nous ferons appel au champ lumineux, ou plus généralement au champ électromagnétique, pour jouer ce rôle. En effet, la rugosité de la surface du diélectrique diffuse le champ lumineux incident ce qui modifie le potentiel dipolaire de l'onde évanescente. En outre, l'interaction de VAN DER WAALS contient une « correction rugueuse » si l'on y tient compte de la structure de l'interface. Dans les deux cas, nous pouvons décrire la rugosité du miroir à atomes par un *potentiel rugueux* qui diffuse l'atome à son tour. Pour un potentiel rugueux donné, notre objectif est alors de préciser son lien avec le profil de la surface rugueuse et d'évaluer la probabilité de réflexion diffuse pour une onde atomique, ainsi que la divergence angulaire des atomes réfléchis. Nous établissons ainsi des contraintes sur la rugosité de surface du diélectrique et sur l'intensité du champ lumineux diffusé : le miroir est de bonne qualité si la probabilité de réflexion diffuse est la plus petite possible.

Quant aux expériences de réflexion d'atomes, la réflexion diffuse a été observée dans un passé relativement récent par notre groupe à Orsay (« *Specular versus diffuse reflection of atoms from an evanescent wave mirror* »[1]). Les atomes sont réfléchis en incidence normale, et l'on sélectionne une distribution de vitesse transverse avec une largeur de l'ordre de la vitesse de recul, en limitant la taille du miroir. Cette sélection revient a collimater le « faisceau atomique » par une fente. Après la réflexion, l'on observe que la distribution de vitesse s'est élargie à une largeur de quelques vitesses de recul. Cette largeur semble corrélée avec la rugosité de la surface du diélectrique qui est utilisée pour créer l'onde évanescente. Nous notons encore que dans les expériences de réflexion en incidence rasante, un élargissement du faisceau atomique a été observée sans que le phénomène ait été étudié davantage [18, 17]. Tout au plus, l'élargissement fut attribué soit à l'émission spontanée dans l'onde évanescente [19], soit au profil d'intensité gaussien de l'onde évanescente qui crée un miroir avec une surface convexe [12]. Dans un interféromètre atomique avec un miroir à atomes, le groupe de J. DALIBARD au Laboratoire KASTLER–BROSSEL de l'Ecole Normale Supérieure (Paris) [85] a constaté que les défauts de la surface du diélectrique imposent une limite à la taille du miroir pour maintenir la cohérence des atomes réfléchis.

La réflexion diffuse par le miroir à atomes est une « mauvaise nouvelle » pour l'optique atomique, mais nous pouvons étudier ce phénomène encore sous un autre point de vue : s'il est vrai que l'atome est sensible à la rugosité de la surface du diélectrique, peut-on se servir de la distribution angulaire des atomes réfléchis pour obtenir des renseignements sur le profil de la surface ? L'on disposerait alors d'un outil d'analyse de haute sensibilité. Pour ce problème se pose la question d'extraire l'information sur la surface d'une mesure portant sur les atomes réfléchis. S'il s'agit d'un processus de diffusion simple, l'on peut s'attendre à ce que la section efficace de diffusion soit proportionnelle à la transformée de FOURIER du profil de la surface. En fait, nous verrons que l'atome est seulement sensible à une certaine plage de composantes de FOURIER de la surface. La réflexion diffuse d'atomes présente alors une résolution voisine de la microscopie optique en champ proche [62, 63, 64, 65]. En particulier, l'atome n'est pas sensible à des structures à l'échelle atomique de la surface, comme c'est le cas pour d'autres méthodes d'analyse de surface (la diffraction d'électrons lents, « *low energy electron diffraction (LEED)* », ou d'atomes d'Hélium thermiques [6], par exemple).

Dans la description théorique de la réflexion diffuse d'atomes, il est nécessaire de conjuguer la théorie de la diffraction avec une approche statistique pour la surface rugueuse. En effet, le profil de la surface est en général une fonction compliquée, et nous

[1] A. LANDRAGIN, G. LABEYRIE, C. HENKEL, R. KAISER, N. VANSTEENKISTE, C. I. WESTBROOK et A. ASPECT, *Opt. Lett.* **21**, 1581 (1996), réf. [66].

devons nous restreindre à n'en décrire que des propriétés moyennes pour pouvoir faire des prédictions. Nous aurons alors affaire à un problème de diffusion par un potentiel stochastique. Pour chaque composante de FOURIER de la rugosité, la réflexion diffuse est équivalente à la diffraction par un potentiel d'interaction périodique. Nous sommes ainsi amené à calculer une *fonction de réponse atomique* qui caractérise la probabilité de réflexion diffuse pour une composante de FOURIER donnée de la surface rugueuse.

Une telle approche est bien adaptée pour l'interaction de l'atome avec les potentiels rugueux présents au voisinage de la surface du diélectrique. La réflexion diffuse ressemble alors à une «collision» dont la «section efficace» est reliée à la fonction de réponse atomique. Par contre, la surface rugueuse du diélectrique donne également lieu à un champ lumineux diffus dans le champ lointain au-dessus de la surface, avec lequel l'atome interagit pendant un temps plus long. Le mouvement de l'atome peut alors devenir diffusif, et des approches théoriques différentes sont nécessaires pour caractériser l'évolution de la distribution des vitesses atomique.

Soulignons pour finir que le processus de réflexion diffuse étudié ici a lieu en l'absence d'émission spontanée ; nous supposons en effet que l'atome interagit avec des potentiels conservatifs. Pour une surface rugueuse donnée, l'onde atomique est certes diffusée par un potentiel déterminé ; c'est seulement parce que nous ignorons la forme explicite du potentiel rugueux qu'il nous faut introduire une description statistique et qu'apparaît une distribution angulaire moyenne pour les atomes réfléchis. Le fait que cette distribution puisse présenter une composante spéculaire est d'ailleurs une signature de la nature ondulatoire des atomes : si nous décrivons l'atome par une particule classique, il est inévitable qu'un transfert de vitesse ait lieu, aussi faible que soit la rugosité. Rappelons le phénomène analogue pour la diffraction : la distribution de vitesse classique présente toujours un élargissement non nul, quel que soit le contraste du réseau de diffraction ; dans la figure de diffraction par contre, l'ordre spéculaire peut être complètement dominant si la phase de la fonction d'onde réfléchie est faiblement modulée.

L'organisation de la partie III

Chap. 13. Nous commençons par présenter l'approche statistique nécessaire pour décrire une **surface rugueuse**. En particulier, nous introduisons la densité spectrale de la rugosité qui caractérise les propriétés moyennes de la surface.

Chap. 14. La réflexion d'une onde par un **miroir rugueux** demande également une approche statistique. Nous introduisons une probabilité différentielle moyenne pour la réflexion diffuse, ainsi que la fonction de cohérence de l'onde réfléchie. Ces notions sont illustrées pour le cas simple d'un miroir parfait (infini) rugueux.

Chap. 15. Nous identifions deux mécanismes physiques qui rajoutent au voisinage de la surface du diélectrique, des **potentiels rugueux** au potentiel dipolaire du miroir à onde évanescente : l'interaction de VAN DER WAALS et l'interférence de la lumière diffusée par la surface avec l'onde évanescente du miroir plan. Nous calculons une «rugosité effective» pour le miroir à atomes qui est due à ces deux mécanismes, ainsi que la largeur de la distribution de vitesse des atomes diffusés. Deux régimes différents sont identifiés : un régime quasi-spéculaire où la diffusion par le potentiel rugueux est faible et peut être caractérisée dans l'approximation de BORN ; et un régime diffus où la distribution de vitesse ne contient plus de composante spéculaire. C'est l'approximation du réseau de phase mince qui permet de caractériser ce dernier régime.

En annexe du chapitre 15, nous reproduisons l'article «*Diffuse atomic reflection at a rough mirror*» par C. H., K. MØLMER, R. KAISER, N. VANSTEENKISTE, C. I. WESTBROOK et A. ASPECT, qui a été accepté le 17 octobre 1996 pour publication dans la *Physical Review A* (à paraître en février 1997). Dans ce travail, nous étudions le potentiel rugueux créé par l'interférence entre la lumière diffusée et l'onde évanescente.

Chap. 16. Nous étudions de façon qualitative le mouvement d'un atome dans le potentiel dipolaire de la **lumière diffusée dans le champ lointain**, à grande distance de la surface. Nous constatons qu'aux temps d'interaction longs, la distribution de vitesse s'élargit de façon diffusive, similaire à un mouvement Brownien. Finalement, au

Chap. 17, nous comparons les différentes mécanismes de la réflexion diffuse et résumons les images physiques qui ont été dégagées pour la décrire.

Remarque : Note pour la lecture. Le chapitre 14 introduit les notions de base pour caractériser la réflexion diffuse. Il peut être lu avant le chapitre 13 où l'approche statistique est présentée d'une façon un peu plus formelle. Au chapitre 15, les résultats pour le potentiel rugueux dû à l'interférence de la lumière diffusé sont seulement résumés ; nous donnons les détails du calcul dans l'article «*Diffuse atomic reflection at a rough mirror*» reproduit à l'annexe 15.B. Au chapitre 16, nous nous servons de quelques résultats donnés à l'annexe 15.B : d'une part pour le champ lumineux diffusé et d'autre part pour la variante statistique de l'approximation du réseau de phase mince.

Chapitre 13

Description statistique d'une surface rugueuse

Nous présentons dans ce chapitre un modèle statistique pour décrire une surface rugueuse. Cette approche permet de calculer des valeurs moyennes de certaines quantités physiques qui interviennent dans l'interaction de la lumière ou des atomes avec une surface rugueuse. Nous allons supposer que les propriétés statistiques de la surface sont caractérisées par la densité spectrale du profil. Dans la deuxième moitié du chapitre, nous présentons des mesures expérimentales qui permettent d'obtenir la densité spectrale.

13.1 Modèle statistique

13.1.1 Le profile de surface

Nous allons décrire la surface rugueuse par la notation représentée sur la figure 13.1 : les points de la surface sont donnés par

$$(x, y, z) = (\mathbf{R}, s(\mathbf{R})) \tag{13.1}$$

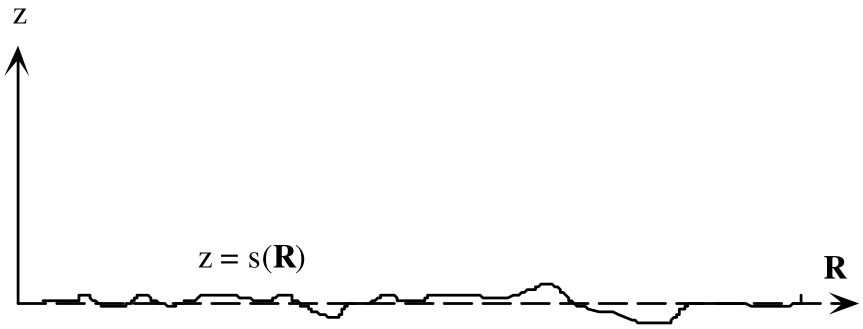

Figure 13.1: Notations pour décrire une surface rugueuse.

où $s(\mathbf{R})$, le *profil de surface*, est sa déviation du plan de référence $z = 0$. Nous suivons la convention de CABRERA, CELLI, GOODMAN et MANSON [58] et notons les coordonnées parallèles au plan xOy par le vecteur à deux composantes $\mathbf{R} = (x, y)$. De façon analogue, les composantes (k_x, k_y) d'un vecteur d'onde $\mathbf{k}$ seront notées par $\mathbf{K}$.

Le profil $s(\mathbf{R})$ de la surface est en général une fonction compliquée, et il est difficile de l'obtenir explicitement. Nous avons donc recours à une approche statistique où n'interviennent que ses propriétés moyennes. Plus précisément, nous modélisons le profil $s(\mathbf{R})$ par un *processus aléatoire gaussien invariant par translation qui vaut zéro en moyenne*. Expliquons-nous.

Propriétés statistique en un point

A une position $\mathbf{R}$ donnée, nous modélisons la côte $s = s(\mathbf{R})$ par une *variable aléatoire* qui est caractérisée par une densité de probabilité $\rho_{\mathbf{R}}(s)$. Sa valeur moyenne s'annule

$$\langle s(\mathbf{R}) \rangle \equiv \int \mathrm{d}s \, \rho_{\mathbf{R}}(s) \, s = 0, \tag{13.2}$$

et son écart quadratique moyen vaut

$$\left\langle s^2(\mathbf{R}) \right\rangle \equiv \int \mathrm{d}s \, \rho_{\mathbf{R}}(s) \, s^2 = \sigma^2. \tag{13.3}$$

Nous appelerons la quantité σ la *rugosité* de surface.

La densité de probabilité $\rho_{\mathbf{R}}(s)$ contient toutes les informations statistiques sur le profil en un point $\mathbf{R}$ donné. Le fait que le processus aléatoire soit *gaussien* implique en particulier que $\rho_{\mathbf{R}}(s)$ est une densité de probabilité gaussienne. Au lieu de la densité de probabilité $\rho_{\mathbf{R}}(s)$, il est plus commode d'utiliser la *fonction caractéristique* $M_{\mathbf{R}}(\mu)$ qui contient l'information équivalente : elle est définie par la valeur moyenne

$$M_{\mathbf{R}}(\mu) \equiv \langle \exp \mathrm{i}\mu s(\mathbf{R}) \rangle = \int \mathrm{d}s \, \rho_{\mathbf{R}}(s) \, \exp \mathrm{i}\mu s. \tag{13.4}$$

Remarquons qu'elle est la transformée de FOURIER de la densité de probabilité $\rho_{\mathbf{R}}(s)$ par rapport à la côte s. En développant la fonction caractéristique en puissances du paramètre μ, nous retrouvons les valeurs moyennes $\langle s^n(\mathbf{R}) \rangle$ (les « moments ») du profil de surface :

$$M_{\mathbf{R}}(\mu) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}\mu)^n}{n!} \langle s^n(\mathbf{R}) \rangle \,. \tag{13.5}$$

Le développement de la fonction caractéristique « génère » donc les moments de la variable aléatoire $s(\mathbf{R})$, c'est pour cette raison que l'on appelle $M_{\mathbf{R}}(\mu)$ aussi la fonction génératrice.

Comme la densité de probabilité $\rho_{\mathbf{R}}(s)$ est une gaussienne, la fonction caractéristique vaut

$$M_{\mathbf{R}}(\mu) = \exp\left(-\frac{\mu^2}{2} \sigma^2 \right) . \tag{13.6}$$

Il s'ensuit que le moment d'ordre quatre, par exemple, vaut $\langle s^4(\mathbf{R}) \rangle = 3\sigma^4$.

Fonction de corrélation en deux points

La densité de probabilité «en un point» $\rho_{\mathbf{R}}(s)$ [ou la fonction generatrice $M_{\mathbf{R}}(\mu)$] ne contient pas encore toutes les propriétés de la surface rugueuse. En effet, nous pouvons également considérer une mesure conjointe des profils à deux positions $\mathbf{R}_1$ et $\mathbf{R}_2$. Cette mesure donne accès à la *fonction de corrélation*

$$C_s(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \equiv \langle s(\mathbf{R}_1) s(\mathbf{R}_2) \rangle \,. \tag{13.7}$$

Notons que par sa définition même, la fonction de corrélation est paire : $C_s(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = C_s(\mathbf{R}_2, \mathbf{R}_1)$.

La fonction de corrélation exprime dans quelle mesure les côtes de la surface aux positions $\mathbf{R}_1$ et $\mathbf{R}_2$ ne sont pas indépendantes : dans la limite $\mathbf{R}_2 \to \mathbf{R}_1$, nous avons $s(\mathbf{R}_2) \to s(\mathbf{R}_1)$, et la fonction de corrélation tend vers $\langle s^2(\mathbf{R}_1) \rangle = \sigma^2$; pour une grande distance entre $\mathbf{R}_1$ et $\mathbf{R}_2$, par contre, les côtes $s(\mathbf{R}_1)$ et $s(\mathbf{R}_2)$ n'ont plus aucune relation entre elles, et la fonction de corrélation tend vers $\langle s(\mathbf{R}_1) \rangle \langle s(\mathbf{R}_2) \rangle = 0$ à cause de (13.2).

Le fait que le processus aléatoire soit *statistiquement invariant par translation* implique que la fonction de corrélation (13.7) ne dépend que de la différence des positions :[1]

$$C_s(\mathbf{R}_2, \mathbf{R}_1) = C_s(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2). \tag{13.8}$$

Nous représentons des exemples de fonctions de corrélation sur la figure 13.2. La distance-type $\ell_c = |\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1|$ sur laquelle les corrélations entre deux points de la surface disparaissent, s'appelle la *longueur de corrélation*.

Le résultat d'une mesure simultanée des profils $s_1 = s(\mathbf{R}_1)$ et $s_2 = s(\mathbf{R}_2)$ est distribué selon une densité de probabilité jointe $\rho_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2}(s_1, s_2)$. De façon équivalente, la statistique de la surface en deux points est contenue dans la fonction caractéristique

$$M_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2}(\mu_1, \mu_2) \equiv \langle \exp[\mathrm{i}\mu_1 s(\mathbf{R}_1) + \mathrm{i}\mu_2 s(\mathbf{R}_2)] \rangle \,. \tag{13.9}$$

Pour le cas d'un processus gaussien invariant par translation, elle prend la forme[2]

$$M_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2}(\mu_1, \mu_2) = \exp\left\{ -\frac{1}{2} \left[\mu_1^2 \sigma^2 + 2\mu_1\mu_2 C_s(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1) + \mu_2^2 \sigma^2 \right] \right\} . \tag{13.10}$$

Par transformée de FOURIER inverse par rapport à μ_1 et μ_2, nous obtenons la densité de probabilité conjointe pour les côtes s_1 et s_2 :

$$\rho_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2}(s_1, s_2) = \frac{1}{2\pi\sigma^2\sqrt{1 - C_{12}^2}} \exp\left[-\frac{s_1^2 + 2C_{12}s_1 s_2 + s_2^2}{2\sigma^2(1 - C_{12}^2)} \right] \tag{13.11}$$

[1] Pour un processus aléatoire $s(t)$ dépendant du temps, cette propriété est satisfaite si $s(t)$ est un processus *stationnaire*. La fonction de corrélation dépend alors seulement de la différence de temps : $\langle s(t_1)s(t_2) \rangle = \langle s(0)s(t_2 - t_1) \rangle$.

[2] M. NIETO-VESPERINAS, *Scattering and Diffraction in Physical Optics*, équation (7.41).

où nous avons noté la fonction de corrélation $C_s(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)$ par C_{12} pour alléger l'écriture. Les côtes s_1 et s_2 sont donc des *variables aléatoires gaussiennes* (parce que leur densité de probabilité est l'exponentielle d'une forme quadratique). Cependant, à cause du terme $C_{12}s_1s_2$ dans l'argument de l'exponentielle, la densité de probabilité (13.11) ne se décompose pas en un produit de deux lois de probabilités pour les côtes s_1 et s_2 ; ceux-ci ne sont donc *pas des variables aléatoires indépendantes*. C'est seulement dans la limite $|\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1| \gg \ell_c$ qu'elles deviennent indépendantes parce que la fonction de corrélation C_{12} tend vers zéro.

Caractérisation statistique à tous les ordres

Finalement, toutes les propriétés statistiques de la surface sont contenues dans une hiérarchie infinie de fonctions de corrélations

$$\langle s(\mathbf{R}_1)\, s(\mathbf{R}_2) \ldots s(\mathbf{R}_n) \rangle \,, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{13.12}$$

On peut les trouver toutes à partir de la «fonctionnelle caractéristique» $M[\{\mu(\mathbf{R})\}]$ qui est définie par la valeur moyenne

$$M[\{\mu(\mathbf{R})\}] \equiv \left\langle \exp \mathrm{i} \int \mathrm{d}\mathbf{R}\, \mu(\mathbf{R})\, s(\mathbf{R}) \right\rangle . \tag{13.13}$$

La fonctionnelle génératrice dépend de la fonction $\mu(\mathbf{R})$. Elle généralise les fonctions caractéristiques $M_{\mathbf{R}_1}(\mu)$ (13.4) et $M_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2}(\mu_1, \mu_2)$ (13.9) que l'on retrouve pour $\mu(\mathbf{R}) = \mu\, \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_1)$ et $\mu(\mathbf{R}) = \mu_1\, \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_1) + \mu_2\, \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_2)$. Pour obtenir la fonction de corrélation (13.12), nous prenons $\mu(\mathbf{R}) = \sum_{j=1}^{n} \mu_j \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j)$ et identifions le terme proportionnel au produit $\mu_1\mu_2 \ldots \mu_n$ dans le développement limité de la fonctionnelle caractéristique (13.13) en fonction des μ_j.

La propriété importante des processus aléatoires gaussiens est que leur fonctionnelle caractéristique est connue et prend une forme simple. Pour le cas d'un processus de valeur moyenne nulle et invariant par translation, elle est donnée par[3]

$$M[\{\mu(\mathbf{R})\}] = \exp\left[-\frac{1}{2} \int \mathrm{d}\mathbf{R}\, \mathrm{d}\mathbf{R}'\, \mu(\mathbf{R})\mu(\mathbf{R}')\, C_s(\mathbf{R}' - \mathbf{R}) \right] . \tag{13.14}$$

A cause de cette forme de la fonctionnelle caractéristique, toutes les fonctions de corrélation à n points avec $n > 2$ d'un processus aléatoire gaussien s'expriment à l'aide de la seule fonction de corrélation $C_s(\mathbf{R}' - \mathbf{R})$. A titre d'exemple, la corrélation à quatre points vaut

$$\begin{aligned} \langle s(\mathbf{R}_1)\, s(\mathbf{R}_2)\, s(\mathbf{R}_3)\, s(\mathbf{R}_4) \rangle &= C_s(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)\, C_s(\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_4) + \\ &+ C_s(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_3)\, C_s(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_4) + C_s(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_4)\, C_s(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_3), \end{aligned} \tag{13.15}$$

alors que les corrélations pour n impair s'annulent.[4]

[3] L. MANDEL et E. WOLF, *Optical Coherence and Quantum Optics*, équation (2.1–11), réf. [142].

[4] Ceci est un résultat particulier du «théorème de WICK». Dans le contexte des processus aléatoires, ce théorème s'appelle encore le «théorème des moments gaussiens» (*gaussian moment theorem*) [142].

13.1.2 Spectre de FOURIER

Nous pouvons également exprimer les propriétés statistiques de la surface par sa transformée de FOURIER. Nous supposons que ce développement existe de sorte que le profil de surface peut s'écrire sous la forme :

$$s(\mathbf{R}) = \int \frac{\mathrm{d}^2\mathbf{Q}}{(2\pi)^2} S(\mathbf{Q})\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{Q}\,\mathbf{R}}, \tag{13.16}$$

où $\mathbf{Q} = (q_x, q_y)$ est un vecteur d'onde (ou une *fréquence spatiale*[5]) parallèle au plan $z = 0$. Comme le profil $s(\mathbf{R})$ est une quantité réelle, nous observons que sa transformée de FOURIER $S(\mathbf{Q})$ vérifie la propriété

$$S(-\mathbf{Q}) = S^*(\mathbf{Q}). \tag{13.17}$$

Pour une surface de taille finie L^2, le développement (13.16) devient

$$s(\mathbf{R}) = \frac{1}{L^2} \sum_{n_x, n_y} S(\mathbf{Q}_{n_x,n_y})\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{Q}_{n_x,n_y}\,\mathbf{R}}, \tag{13.18}$$

où les vecteurs d'ondes discrets $\mathbf{Q}_{n_x,n_y}$ sont donnés par

$$\mathbf{Q}_{n_x,n_y} = \frac{2\pi}{L} \left(n_x, n_y\right), \tag{13.19}$$

avec n_x, n_y des entiers (positifs ou négatifs).

Densité spectrale

L'équation (13.2) implique que les coefficients de FOURIER du profil s'annulent en moyenne

$$\langle S(\mathbf{Q}) \rangle = 0. \tag{13.20}$$

Ensuite, la corrélation entre les fréquences spatiales $\mathbf{Q}_1$ et $\mathbf{Q}_2$ vaut, en utilisant la fonction de corrélation (13.7) et l'invariance par translation (13.8),

$$\langle S^*(\mathbf{Q}_1) S(\mathbf{Q}_2) \rangle = (2\pi)^2\, \delta(\mathbf{Q}_1 - \mathbf{Q}_2)\, \mathcal{P}_s(\mathbf{Q}_1), \tag{13.21}$$

où $\mathcal{P}_s(\mathbf{Q})$ est la transformée de FOURIER de la fonction de corrélation

$$\mathcal{P}_s(\mathbf{Q}) = \int \mathrm{d}\Delta\mathbf{R}\; C_s(\Delta\mathbf{R})\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{Q}\cdot\Delta\mathbf{R}}. \tag{13.22}$$

Cette quantité s'appelle la *densité spectrale* (ou le spectre) de puissance de la rugosité de surface. Elle donne la valeur quadratique moyenne du profil de surface à une

[5] Au sens stricte, les composantes q_x, q_y représentent des « pulsations » spatiales, mais nous n'allons pas faire cette distinction ici.

fréquence spatiale donnée. Pour une surface finie d'aire L^2, la corrélation (13.21) devient

$$\langle S^*(\mathbf{Q}_1)S(\mathbf{Q}_2)\rangle = L^2\delta_{\mathbf{Q}_1,\mathbf{Q}_2}\mathcal{P}_s(\mathbf{Q}_1), \tag{13.23}$$

où $\delta_{\mathbf{Q}_1,\mathbf{Q}_2}$ est le symbôle de KRONECKER habituel. La relation (13.22) entre la densité spectrale et la fonction de corrélation est le théorème de WIENER et KHINTCHINE [142].[6] Dans l'hypothèse d'une surface à statistique gaussienne, la densité spectrale (étant la transformée de FOURIER de la fonction de corrélation) contient donc toutes les propriétés statistiques de la surface.

En prenant l'inverse de (13.22) et en sachant que la fonction de corrélation vaut σ^2 pour $\Delta\mathbf{R} = 0$, nous obtenons la rugosité de surface σ comme une intégrale sur toutes les fréquences spatiales de la densité spectrale :

$$\sigma^2 = \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{Q}}{(2\pi)^2}\,\mathcal{P}_s(\mathbf{Q}). \tag{13.24}$$

Cette expression montre que la rugosité de surface contient beaucoup moins d'information que la densité spectrale. Notons encore qu'une mesure expérimentale de rugosité donne une valeur pour σ qui est l'intégrale de la densité spectrale sur une bande limitée de fréquences spatiales qui dépend de la résolution (transverse) de l'appareil de mesure.

La représentation de FOURIER du processus aléatoire $s(\mathbf{R})$ présente l'avantage que dans la fonction $S(\mathbf{Q})$, considérée comme un processus aléatoire, les amplitudes $S(\mathbf{Q})$ sont non corrélées comme le montre l'expression (13.21). Nous pouvons même montrer qu'elles sont des variables aléatoires indépendantes si la surface a une statistique gaussienne : considérons à cet effet la fonctionnelle caractéristique définie par

$$\tilde{M}[\{\xi(\mathbf{Q})\}] = \left\langle \exp \mathrm{i} \int \mathrm{d}\mathbf{Q}\,\xi^*(\mathbf{Q})\,S(\mathbf{Q})\right\rangle, \tag{13.25}$$

où la fonction complexe $\xi(\mathbf{Q})$ a la même symétrie (13.17) que l'amplitude de FOURIER $S(\mathbf{Q})$: $\xi(-\mathbf{Q}) = \xi^*(\mathbf{Q})$. Pour calculer (13.25), nous utilisons la fonctionnelle caractéristique $M[\{\mu(\mathbf{R})\}]$ définie à (13.13), avec $\mu(\mathbf{R})$ donné par

$$\mu(\mathbf{R}) = \int \mathrm{d}\mathbf{Q}\,\xi^*(\mathbf{Q})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{QR}}. \tag{13.26}$$

En utilisant l'expression (13.14) pour $M[\{\mu(\mathbf{R})\}]$ et l'invariance par translation, on obtient alors

$$\tilde{M}[\{\xi(\mathbf{Q})\}] = \exp\left[-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}\mathbf{Q}\ |\xi(\mathbf{Q})|^2\ (2\pi)^2\mathcal{P}_s(\mathbf{Q})\right]. \tag{13.27}$$

Comme cette fonctionnelle caractéristique est l'exponentielle d'une forme quadratique, la transformée de FOURIER $S(\mathbf{Q})$ est *également un processus aléatoire gaussien*, comme c'est le cas à l'équation (13.14) pour le profil $s(\mathbf{R})$. En outre, la fonctionnelle caractéristique (13.27) est un produit (infini) de fonctions caractéristiques pour

[6] Notons que ce théorème existe même si le profil de surface lui-même n'admet pas de transformée de FOURIER ; il suffit en effet que cette transformée existe pour la fonction de corrélation de la surface.

chacune des fréquences spatiales $\mathbf{Q}$. En prenant la transformée de FOURIER inverse [pour l'ensemble continu des $\xi(\mathbf{Q})$], l'on trouve alors que la densité de probabilité pour les amplitudes de FOURIER $S(\mathbf{Q})$ se factorise, les $S(\mathbf{Q})$ sont donc des variables aléatoires indépendantes.

Exemples

Une densité spectrale particulièrement simple est une constante (un «bruit blanc»),

$$\mathcal{P}_s(\mathbf{Q}) = (\sigma/K)^2, \tag{13.28}$$

où σ/K est une rugosité *rms* par unité de fréquence spatiale. La fonction de corrélation est alors une fonction δ :

$$C_s(\Delta\mathbf{R}) = (\sigma/K)^2 \delta(\Delta\mathbf{R})\,, \tag{13.29}$$

et les côtes $s(\mathbf{R}_1)$ et $s(\mathbf{R}_2)$ sont des variables aléatoires non corrélées et indépendantes pour $\mathbf{R}_1 \neq \mathbf{R}_2$ [voir la fonctionnelle caractéristique (13.14) dans ce cas].

Expérimentalement, l'on rencontre souvent des densités spectrales en loi de puissance, $\mathcal{P}_s(\mathbf{Q}) \propto |\mathbf{Q}|^{-\alpha}$, qui ont une portée assez longue. Dans ce cas, la rugosité σ n'est finie que si l'exposant α est strictement supérieur à 2 [sinon l'intégrale (13.24) diverge à la limite $|\mathbf{Q}| \to \infty$] et si l'on introduit une coupure aux basses fréquences, par exemple de la forme suivante

$$\mathcal{P}_s(\mathbf{Q}) = \frac{\sigma^2}{\Lambda^2} \frac{2\pi(\alpha - 2)}{(1 + \mathbf{Q}^2/\Lambda^2)^{\alpha/2}}, \tag{13.30}$$

où le vecteur d'onde Λ régularise la divergence de la densité spectrale à $\mathbf{Q} \to \mathbf{0}$. La fonction de corrélation est alors donnée par[7]

$$C_s(\Delta\mathbf{R}) = \frac{2\sigma^2}{\Gamma(\alpha/2 - 1)} \left(\frac{\Lambda|\Delta\mathbf{R}|}{2} \right)^{\alpha/2-1} K_{\alpha/2-1}(\Lambda|\Delta\mathbf{R}|) \tag{13.31}$$

où $\Gamma(\cdot)$ est la fonction Gamma d'EULER et $K_\nu(\cdot)$ la fonction de BESSEL modifiée de la deuxième espèce. Nous avons supposé ici que la densité spectrale est invariante par rotation dans le plan des vecteurs d'onde $\mathbf{Q}$. Il s'ensuit que la fonction de corrélation est aussi invariante par rotation dans le plan xOy. La fonction de corrélation (13.31) est représentée sur la figure 13.2, pour quelques valeurs de l'exposant α. Notons que dans le cas particulier $\alpha = 3$, elle décroît de façon exponentielle, $C_s(\Delta\mathbf{R}) = \sigma^2 \exp(-\Lambda|\Delta\mathbf{R}|)$. Cette forme pour les corrélations a été proposée par EASTMAN [59] sur la base d'observations expérimentales et utilisée par le groupe de PELLETIER [61].

[7] La transformée de FOURIER inverse de la densité spectrale (13.30) se calcule à l'aide des formules 6.2.1 et 6.2.2 du *Handbook of Mathematical Functions*, édité par M. ABRAMOWITZ et I. A. STEGUN.

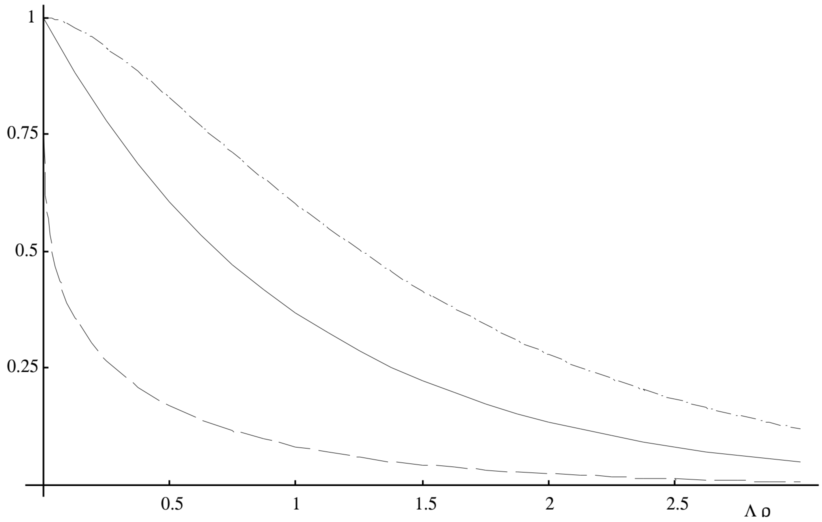

Figure 13.2: Fonction de corrélation (13.31) pour des exposants différents, en fonction de la distance normalisée $\Lambda\rho \equiv \Lambda|\Delta\mathbf{R}|$ et normalisée à l'unité pour $\rho = 0$. Tirets : $\alpha = 2.2$, trait plein : $\alpha = 3$, point-tirets : $\alpha = 4$.

Finalement, du point de vue du calcul analytique, une fonction de corrélation particulièrement commode est une gaussienne :

$$C_s(\Delta\mathbf{R}) = \sigma^2 \exp\left(-\frac{\Delta\mathbf{R}^2}{2\ell_c^2}\right), \tag{13.32}$$

où ℓ_c est la longueur de corrélation. La densité spectrale est alors gaussienne elle aussi :

$$\mathcal{P}_s(\mathbf{Q}) = 2\pi\,\sigma^2\ell_c^2 \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{Q}^2\ell_c^2\right), \tag{13.33}$$

avec une portée de l'ordre de $\delta Q \sim 1/\ell_c$.

Simulation numérique

Rappelons qu'à cause de l'invariance par translation, les amplitudes de FOURIER du profil de surface $S(\mathbf{Q})$ sont des variables aléatoires indépendantes [voir (13.21) et (13.27)]. Nous pouvons tirer profit de cette propriété pour simuler numériquement une surface rugueuse. L'on choisit d'abord une taille finie L^2 pour la surface, les fréquences spatiales prennent alors les valeurs discrètes $\mathbf{Q}_{n_x,n_y}$ données à (13.19). La valeur quadratique moyenne de l'amplitude de FOURIER du profil vaut alors [voir (13.21)]

$$\left\langle |S(\mathbf{Q}_{n_x,n_y})|^2 \right\rangle = L^2\,\mathcal{P}_s(\mathbf{Q}_{n_x,n_y}). \tag{13.34}$$

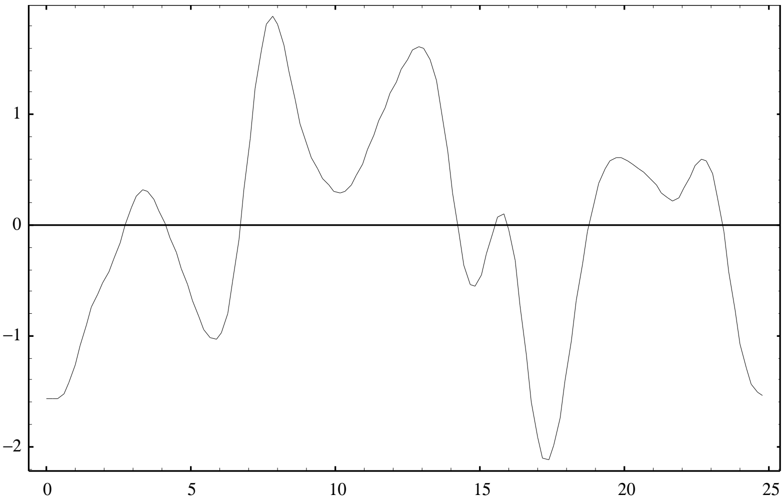

Figure 13.3: Réalisation d'une surface rugueuse à une dimension avec une densité spectrale gaussienne. La rugosité rms σ sert d'unité pour les côtes verticales et la longueur de corrélation ℓ_c d'unité pour les positions transverses x. Dans la simulation, la taille de la surface rugueuse vaut $L = 25\,\ell_c$ et nous avons simulé la surface par 128 points équidistants.

Une possibilité de générer une réalisation particulière de la surface rugueuse est donc de choisir les amplitudes de FOURIER de la façon suivante

$$S(\mathbf{Q}_{n_x,n_y}) = \sqrt{L^2\,\mathcal{P}(\mathbf{Q}_{n_x,n_y})}\,\exp \mathrm{i}\varphi_{n_x,n_y} \tag{13.35}$$

où les phases φ_{n_x,n_y} sont des variables aléatoires indépendantes avec une distribution uniforme entre 0 et 2π. [Le choix (13.35) n'est pas unique, il ignore en particulier des fluctuations du module de $S(\mathbf{Q}_{n_x,n_y})$.] Un exemple de surface aléatoire en une dimension avec une densité spectrale gaussienne est représentée sur la figure 13.3.

13.1.3 Ergodicité

Les valeurs moyennes dont nous avons parlé jusque là, sont à interpréter dans le sens d'une *moyenne d'ensemble* : l'on imagine une collection infinie de réalisations de la surface rugueuse qui sont distribuées selon une densité de probabilité $\rho[\{s(\mathbf{R})\}]$ qui dépend du profil $s(\mathbf{R})$ à toutes les positions $\mathbf{R}$.

Cependant, dans la réalité, l'on ne dispose souvent que d'une seule réalisation d'une surface rugueuse. Nous pouvons alors obtenir quand même ses propriétés statistiques si la rugosité de surface est *ergodique* : ceci veut dire que les valeurs moyennes calculées par rapport à tous les points d'une réalisation particulière de la surface sont identiques aux moyennes sur un ensemble infini de réalisations. Par exemple, l'on peut alors obtenir la rugosité par

$$\sigma^2 \cong \frac{1}{L^2} \int \mathrm{d}\mathbf{R}\, s^2(\mathbf{R}) \tag{13.36}$$

sur une surface de taille L^2, si la moyenne de $s(\mathbf{R})$ sur la surface s'annule.

13.2 Mesures expérimentales

Nous avons effectué des mesures expérimentales de rugosité pour les surfaces de quelques prismes diélectriques qui ont été utilisés à l'Institut d'Optique pour l'expérience du miroir à atomes à onde évanescente. Les mesures ont été faites avec deux méthodes différentes : un profilomètre optique et un microscope à force atomique. Dans ce paragraphe, nous allons d'abord rappeler les principes physiques de ces méthodes et ensuite présenter comment l'on obtient la rugosité et la densité spectrale à partir des données expérimentales.

13.2.1 Méthodes de mesure

Profilomètre optique

Le dispositif central du profilomètre optique de la société Zygo[8] est un interféromètre laser dont le schéma est esquissé sur la figure 13.4. Dans un bras de l'interféromètre, un point $\mathbf{R}$ dans la surface à mesurer sert de miroir (partiellement réfléchissant) pour un faisceau lumineux. Le profil $s(\mathbf{R})$ modifie la phase $\phi(\mathbf{R})$ du faisceau réfléchi :

$$\phi(\mathbf{R}) = 2k\, s(\mathbf{R}), \tag{13.37}$$

où k est le vecteur d'onde du faisceau lumineux.[9] Les variations de la phase $\phi(\mathbf{R})$ du faisceau réfléchi par la surface sont mesurées en le faisant interférer avec un faisceau réfléchi par un point de référence *Réf* fixé sur la surface. L'intensité lumineuse mesurée est alors proportionnelle à

$$I_L \propto |\exp \mathrm{i}\phi(\mathbf{R}) + \exp \mathrm{i}(\phi_{\text{réf}} + \varphi)|^2 \tag{13.38}$$

où φ est la différence de phase entre les deux bras de l'interféromètre. Ce montage interférométrique permet de mesurer des variations verticales du profil de surface en-dessous de la longueur d'onde optique : en effet, en choisissant convenablement la phase φ par rapport à la phase $\phi_{\text{réf}}$ du faisceau de référence et pour une phase $\phi(\mathbf{R})$ faible devant l'unité, la variation δI_L de l'intensité lumineuse est directement proportionnelle au profil de surface :

$$\delta I_L \propto k\, s(\mathbf{R}). \tag{13.39}$$

[8] Zygo Inc., *Heterodyne Profiler*, modèle no. 5500, voir aussi [143].

[9] Le profilomètre « Zygo » utilise une longueur d'onde $2\pi/k = 632\,\mathrm{nm}$.

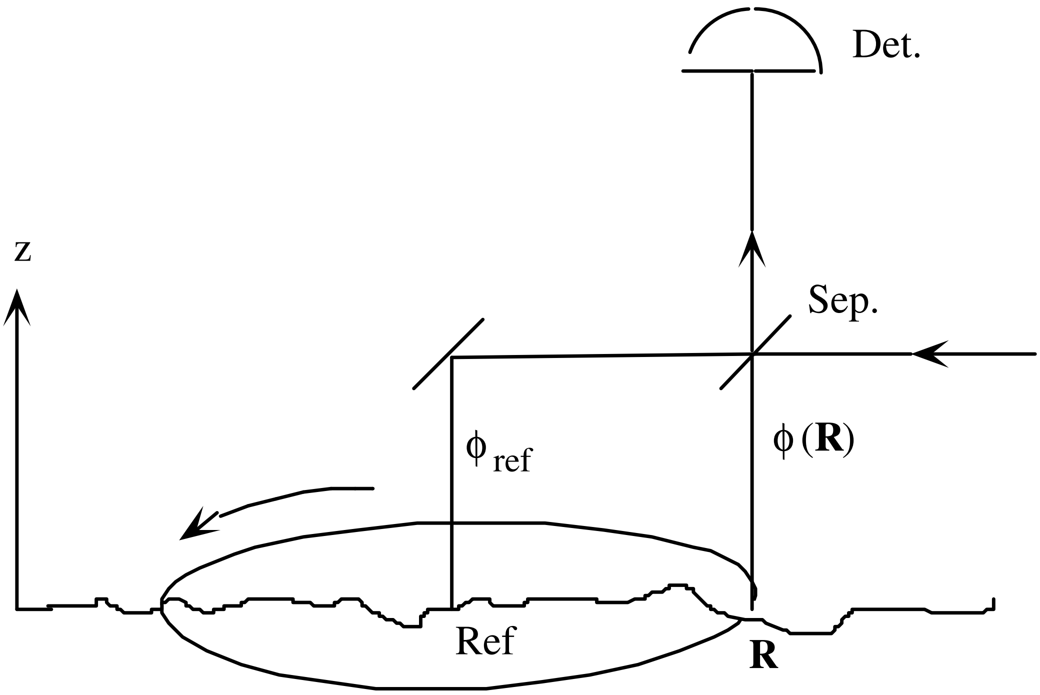

Figure 13.4: Schéma expérimental du profilomètre optique. L'appareil mesure le profil de surface sur un cercle autour de la position de référence Réf.
Sép. : séparatrice, Dét. : détecteur.

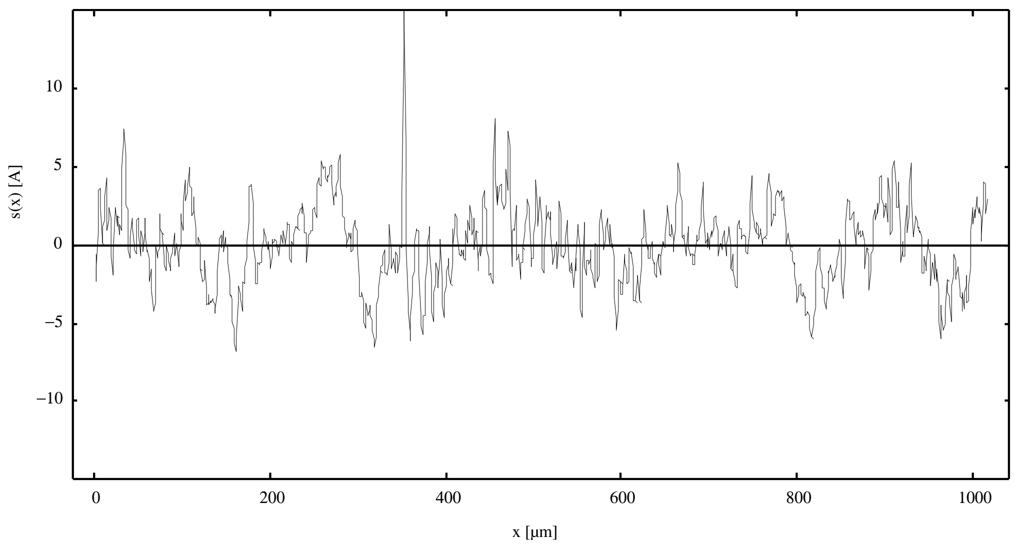

Figure 13.5: Exemple de profil de surface mesuré par le profilomètre optique. Le profil est donné en Å.

Une haute résolution des variations δI_L se traduit donc par une haute résolution du profil $s(\mathbf{R})$. L'appareil avec lequel les mesures ont été faites est spécifié pour une résolution verticale de $\delta s \leq 1\,\text{Å}$.

La mesure est effectuée en déplaçant le point $\mathbf{R}$ sur un cercle centré autour du point de référence *Réf* (voir la figure 13.4), le périmètre de ce cercle vaut $L = 1\,017\,\mu\text{m}$. Le profilomètre couvre donc une partie essentiellement unidimensionnelle de la surface. Le faisceau laser du profilomètre optique est amené par une fibre optique vers l'échantillon et focalisé sur la surface. Selon les spécifications du constructeur, la tâche focale a un diamètre $w_L \approx 2\,\mu\text{m}$. La résolution transverse de la mesure du profil de surface est donc de l'ordre de w_L, et le profilomètre n'est pas sensible à des composantes de FOURIER de la rugosité de surface au-delà d'une fréquence spatiale limite de l'ordre de $q_{\max} \simeq 1/w_L$. Du côté des basses fréquences spatiales, le profilomètre est limité par la longueur L finie du tracé echantillonné, et la fréquence spatiale minimale vaut $q_{\min} \simeq 2\pi/L$.

Un profil-type mesuré par le profilomètre est donné sur la figure 13.5. Les données expérimentales correspondent aux valeurs $s(x_i)$ du profil de surface à un nombre $N = 1024$ de positions x_i équidistantes, avec $\delta x = x_{i+1} - x_i = L/N \approx 1\,\mu\text{m}$. La rugosité

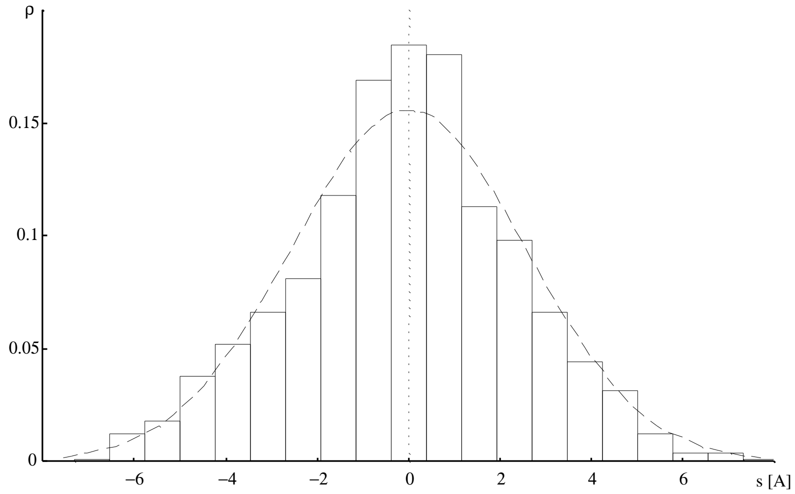

Figure 13.6: Distribution des hauteurs $s(x_i)$ pour les données de la figure 13.5. Tirets : distribution gaussienne centrée à zéro et de même variance σ^2 que la distribution expérimentale.

de surface σ est alors donnée par la version discrète de l'expression (13.36) :

$$\sigma^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} s^2(x_i) \tag{13.40}$$

où nous avons supposé que les points $s(x_i)$ sont de valeur moyenne nulle.

Nous comparons sur la figure 13.6 la distribution des valeurs $s(x_i)$ dans le profil mesuré à une distribution gaussienne avec une variance σ^2. Ceci nous permet de vérifier si la surface a une statistique gaussienne. Nous constatons que la distribution expérimentale est un peu moins large qu'une gaussienne, mais globalement, l'accord est assez satisfaisant. Notons néanmoins que cette mesure ne suffit pas pour affirmer que la statistique de la surface est gaussienne. A cet effet, il faudrait analyser également des distributions analogues pour toutes les fonctions de corrélation. Nous allons quand même supposer une statistique gaussienne parce que cette hypothèse est particulièrement commode pour le calcul théorique.

Sur la figure 13.7, nous représentons la fonction de corrélation à deux points que nous avons calculée à l'aide de l'expression

$$C_s(\Delta x_m) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} s(x_i)\, s(x_{m+i}) \tag{13.41}$$

où la distance entre les points vaut $\Delta x_m = m\,\delta x$. Nous constatons que les corrélations décroissent sur une distance $\ell_c \sim 5\,\mu$m. Les oscillations à plus longue période qui ap-

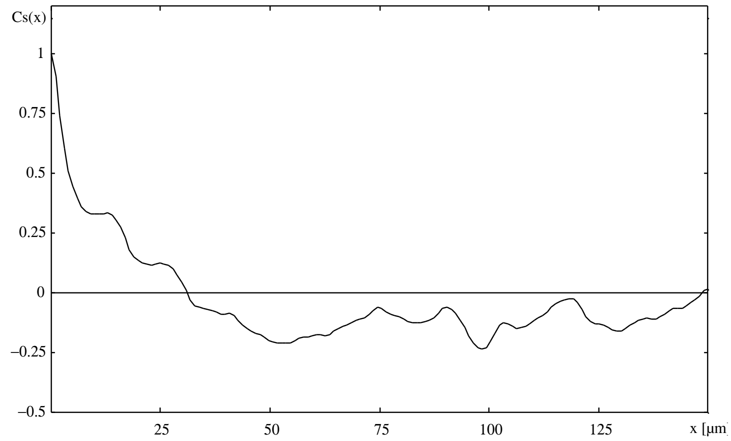

Figure 13.7: Fonction de corrélation (13.41) pour les données de la figure 13.5. Elle est normalisée à l'unité pour $\Delta x = 0$.

paraissent sur la figure 13.7 et qui font que la fonction de corrélation présente aussi des valeurs négatives à certaines distances, sont des artéfacts dus à l'appareil de mesure.[10]

Microscope à force atomique

Le microscope à force atomique permet de mesurer le profil de surface avec une résolution transverse bien meilleure que le profilomètre optique [143, 144]. Il présente même la possibilité de résoudre la structure atomique de la surface, mais nous ne nous sommes pas servi de cette résolution maximale. Son inconvénient est que la mesure couvre la surface sur une taille beaucoup plus petite, de l'ordre de quelques micromètres au carré.

Le principe de l'appareil[11] est esquissé sur la figure 13.8. La surface est balayée par une pointe de silicium cristallin qui est montée sur un levier. A une distance à la surface de quelques Ångström, la pointe est soumise à une force qui varie rapidement avec la distance (attractive à grande distance, puis répulsive à courte distance). Cette force conduit à un fléchissement du levier qui tient la pointe, et en vertu de la loi de HOOK, ce fléchissement est proportionnel à la force exercée sur la pointe. L'on mesure le fléchissement du levier par le déplacement d'un faisceau laser qui est réfléchi par un miroir monté sur le levier. Ce signal permet d'asservir la distance entre la pointe et la surface à une valeur fixe, en déplaçant la surface dans la direction normale avec un élément piézo-électrique. L'échantillon avec la surface à mesurer est montée sur un tube flexible qui est déformé par des éléments piézo-électriques également. L'inflexion

[10] Michel MULLOT, ingénieur de recherche à l'atelier d'optique de l'Institut d'Optique.

[11] Park Scientific Instruments, *Atomic Force Microscope*.

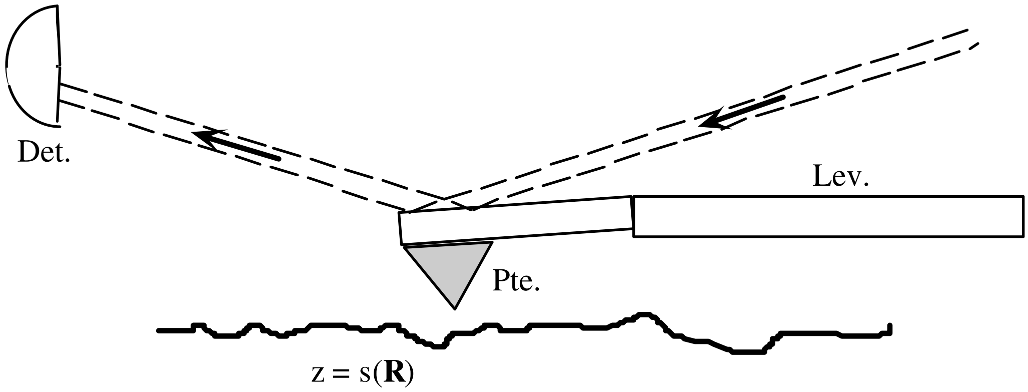

Figure 13.8: Schéma de principe du microscope à force atomique. Pte. : pointe, Lev. : levier, Dét. : détecteur sensible à la position du faisceau laser.

de ce tube déplace la surface dans les directions transverses. Le signal du système d'asservissement de la distance de la pointe permet alors d'obtenir une cartographie de la surface rugueuse.

Le microscope à force atomique fournit une image rectangulaire qui contient N^2 points de mesure avec $N = 256$. Nous avons pris des images en forme de carré avec des arêtes de $7.5\,\mu\mathrm{m}$ et de $1\,\mu\mathrm{m}$. En raison du système de déplacement transverse de la surface, les images brutes contiennent une courbure dans une direction qu'il faut corriger avant de les exploiter. A cet effet, nous avons retranché un polynôme d'ordre 4 de chaque ligne des images de $7.5 \times 7.5\,\mu\mathrm{m}^2$ et un polynôme d'ordre 2 des images de $1 \times 1\,\mu\mathrm{m}^2$, la distorsion étant plus forte pour les images à plus grand format.

Les données expérimentales correspondent aux valeurs $s(x_i, y_j)$ du profil pour un maillage (x_i, y_j) de $N^2 = 256^2$ positions équidistantes dans un carré de taille L^2 ($L = 7.5\,\mu\mathrm{m}$ ou $L = 1\,\mu\mathrm{m}$). La résolution transverse δx est donnée par la distance entre les points de mesure, elle est de $\delta x = 30\,\mathrm{nm}$ pour les images de grande taille et de $\delta x = 4\,\mathrm{nm}$ pour les petites images.[12] Nous représentons une partie d'une image-type du microscope à force atomique sur la figure 13.9. Les valeurs $s(x_i, y_j)$ du profil de surface donnent la rugosité de surface σ par une expression analogue à (13.40).

13.2.2 Résultats pour la rugosité de surface

Nous présentons ici les résultats expérimentaux pour deux surfaces polies de qualités légèrement différentes. La surface A a été fabriquée dans l'atelier d'optique de l'Institut d'Optique à Orsay en polissant un substrat de verre de type «LASFN18», et la surface B par la société General Optics au Etats-Unis, sur un substrat de type «TaFD30». Au tableau 13.1, nous donnons les résultats obtenus pour la rugo-

[12]La limite inférieure pour δx dépend de la taille et de la forme de la pointe qui interagit avec la surface. Elle peut être estimée de l'ordre de quelques Ångström, étant donné que le microscope à force permet de résoudre la structure atomique d'une surface [143, 144].

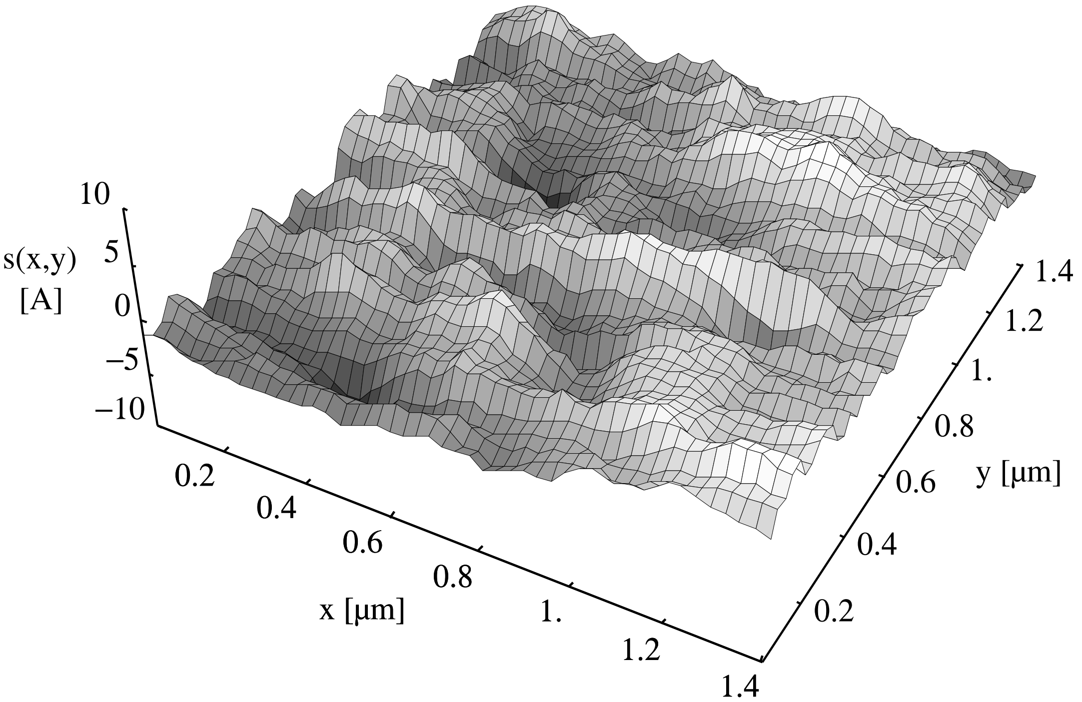

Figure 13.9: Partie d'une image de surface mesurée avec un microscope à force atomique. Cette partie a des dimensions $1.41 \times 1.41\ \mu\mathrm{m}$, *et contient* 48^2 *points de mesure. Le profil de surface est donné en Å.*
L'anisotropie de l'image provient du mécanisme de la prise des données : la pointe du microscope à force atomique balaie la surface le long de la direction Ox, *et en déplaçant l'échantillon dans la direction* Oy, *l'on construit la topographie de la surface ligne par ligne.*

	Prof. opt.	M.f.a., $7.5\,\mu\mathrm{m}$	M.f.a., $1\,\mu\mathrm{m}$
A	2.6	3.0	1.8
B	1.2	2.1	1.0

Tableau 13.1: Rugosité de surface σ (en Å) pour les deux surfaces analysées, obtenues avec le profilomètre optique et le microscope à force atomique (à partir d'images de taille $7.5 \times 7.5\,\mu\mathrm{m}^2$ et $1 \times 1\,\mu\mathrm{m}^2$).
Surface A : superpoli de l'atelier d'optique de l'Institut d'Optique à Orsay (substrat LASFN18), surface B : superpoli de la société General Optics aux Etats-Unis (substrat TaFD30).

sité σ par le profilomètre optique et le microscope à force atomique, en utilisant la formule (13.40). Nous constatons que σ est de l'ordre de l'Ångström, donc très petit par rapport à la longueur d'onde optique.

13.2.3 Détermination de la densité spectrale

Principe du calcul

Les données expérimentales permettent de calculer la transformée de FOURIER discrète du profil de surface. Nous nous sommes restreint à des spectres de FOURIER en une dimension.

Pour obtenir la densité spectrale à partir d'un tracé du profilomètre optique, nous avons découpé le tracé de N points en 8 morceaux $\{s_j(x_i)\}$, $i = (j-1)N' + 1, \dots jN'$, $j = 1, \dots 8$, avec $N' = N/8$ points chacun.[13] Chaque morceau de longueur $L' = L/8$ donne alors un spectre de FOURIER,

$$S_j(q_x) = \delta x \sum_{i=(j-1)N'+1}^{jN'} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q_x x_i} s(x_i), \tag{13.42}$$

où les vecteurs d'onde q_x prennent les valeurs discrètes $q_{x,m} = 2\pi m/L'$ avec $m = -N'/2, \dots N'/2-1$. Nous obtenons la densité spectrale (en une dimension) en prenant la moyenne sur les 8 morceaux des modules au carré des coefficients de FOURIER[14]

$$\mathcal{P}_s^{(1)}(q_x) = \frac{1}{8L'} \sum_{j=1}^{8} |S_j(q_x)|^2 \,. \tag{13.43}$$

[13]Le choix de 8 morceaux est un compromis entre un ensemble statistique suffisamment grand (les 8 morceaux servent de réalisations indépendantes de la surface rugueuse) et une plage de fréquences spatiales suffisamment grande, la fréquence minimale étant $q_{\min} = 2\pi(8/L)$.

[14]Dans cette expression, les modules au carré des coefficients de Fourier sont normalisés par la longueur L' du morceau du tracé, à cause de l'analogue unidimensionnel de la relation (13.23).

Surface	α	$A^{(1)}$	$A^{(2)}$
A	2.4	7.8×10^{-7}	2.0×10^{-6}
B	2.2	2.0×10^{-7}	4.4×10^{-7}

Tableau 13.2: Paramètres pour la densité spectrale en une dimension (13.44) et en deux dimensions (13.46), déduite d'un modèle en forme de loi de puissance.

Pour les images du microscope à force atomique, nous calculons les transformées de FOURIER pour chaque ligne de l'image (avec $N' = 256$ points) et nous calculons la moyenne, sur les 256 colonnes de l'image, de leurs modules au carré.

Présentation des résultats

La densité spectrale (en une dimension) est représentée sur la figure 13.10, en double échelle logarithmique. Nous constatons que les résultats du profilomètre optique et du microscope à force atomique se recouvrent de façon satisfaisante dans la plage de fréquences spatiales commune aux deux méthodes. L'accord n'est pas parfait parce que cette plage correspond, d'une part, aux hautes fréquences du profilomètre optique qui sont modifiées à cause de la taille finie du faisceau laser et d'autre part, aux basses fréquences du microscope à force atomique qui sont déformées par le traitement d'image.

Nous remarquons également que la densité spectrale peut être modélisée de façon satisfaisante sur toute la gamme de fréquences spatiales étudiées par une loi de puissance (les lignes droites en tirets sur la figure 13.10). Pour les deux surfaces analysées, nous avons ainsi obtenu la représentation suivante pour la densité spectrale en une dimension

$$\mathcal{P}_s^{(1)}(q_x) = \frac{A^{(1)}}{k_L^3} \left(\frac{q_x}{k_L} \right)^{-\alpha+1} . \tag{13.44}$$

Nous choisissons comme unité pour les fréquences spatiales q_x le vecteur d'onde optique k_L de la transition à $\lambda_L = 780\,\mathrm{nm}$ de l'atome de ^{85}Rb. Les paramètres sans dimension $A^{(1)}$ et α dans (13.44) sont donnés au tableau 13.2. Dans le paragraphe suivant, nous déduisons une densité spectrale en deux dimensions de ces données (le paramètre $A^{(2)}$ du tableau 13.2).

Relation entre les densités spectrales en une et deux dimensions

Nous pouvons déduire la densité spectrale en deux dimensions $\mathcal{P}_s(q_x, q_y)$ à partir des résultats présents moyennant deux hypothèses :

1. la densité spectrale en deux dimensions est isotrope et ne dépend que du module du vecteur d'onde ;

2. elle a la forme d'une loi de puissance.

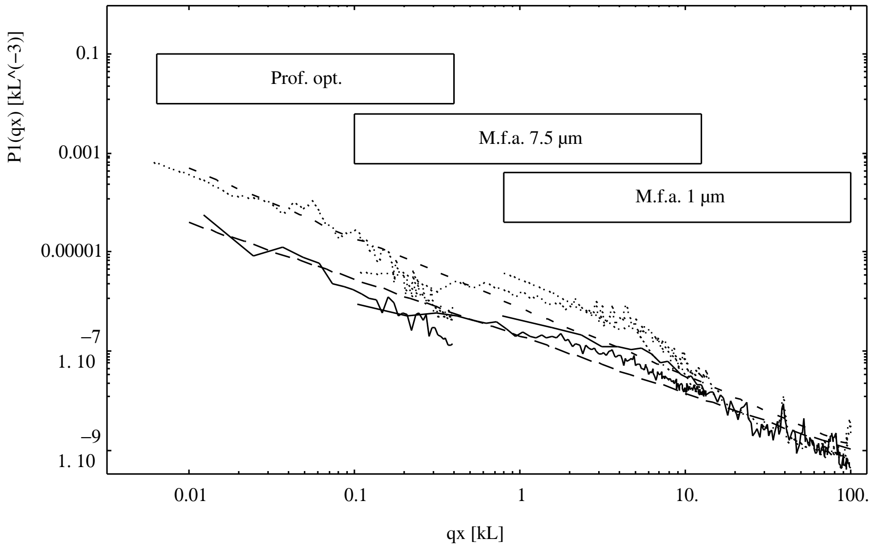

Figure 13.10: Densité spectrale de rugosité de surface, mesurée avec le profilomètre optique (basses fréquences) et avec le microscope à force atomique. Les deux gammes de fréquences spatiales correspondent aux deux tailles d'images.
Trait plein : surface A, pointillées : surface B (voir le tableau 13.2). Les tirets représentent la loi de puissance (13.44) obtenue avec la méthode de moindres carrés, dont les paramètres sont donnés au tableau 13.2.

La première de ces hypothèses semble raisonnable pour les surfaces polies dont il est question ici. Nous montrons maintenant que la deuxième hypothèse implique que la densité spectrale en une dimension est une loi de puissance elle aussi.

Nous nous servons du fait que la densité spectrale en une dimension est obtenue par une intégrale de celle en deux dimensions sur la composante q_y du vecteur d'onde $\mathbf{Q}$. Pour une résolution infinie ($\delta y \to 0$) dans la direction Oy, nous avons

$$\mathcal{P}_s^{(1)}(q_x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}q_y}{2\pi} \mathcal{P}_s(q_x, q_y). \tag{13.45}$$

Si $\mathcal{P}_s(q_x, q_y)$ ne dépend que du module $Q = (q_x^2 + q_y^2)^{1/2}$ et si elle a la forme d'une loi de puissance,

$$\mathcal{P}_s(q_x, q_y) = \frac{A^{(2)}}{k_L^4} \left(\frac{Q}{k_L}\right)^{-\alpha}, \tag{13.46}$$

nous obtenons le résultat suivant

$$\mathcal{P}_s^{(1)}(q_x) = \frac{\Gamma[(\alpha-1)/2]}{2\sqrt{\pi}\,\Gamma[\alpha/2]} \frac{A^{(2)}}{k_L^3} \left(\frac{q_x}{k_L}\right)^{-\alpha+1}. \tag{13.47}$$

La densité spectrale en une dimension est donc une loi de puissance avec un exposant $1 - \alpha$. En comparant à la représentation (13.44), nous constatons que les coefficients $A^{(1)}$ et $A^{(2)}$ ne diffèrent que par un facteur numérique qui dépend de la valeur de α :

$$A^{(1)} = \frac{\Gamma[(\alpha-1)/2]}{2\sqrt{\pi}\,\Gamma[\alpha/2]} A^{(2)} \tag{13.48}$$

Les paramètres $A^{(2)}$ et α pour la densité spectrale en deux dimensions que l'on déduit de ce modèle sont rassemblés au tableau 13.2 pour les deux surfaces A et B.

Remarque. Les résultats expérimentaux de la figure 13.10 suggèrent une meilleure représentation de la densité spectrale en une dimension en utilisant deux lois de puissance sur deux intervalles spectraux différents : une rupture de pente est visible autour du vecteur d'onde $q_x \approx 5\,k_L$. Ce changement d'exposant ne semble pas corrélé avec les plages spectrales des méthodes de mesure. Pour les deux intervalles $q_x = 0.05 \ldots 5\,k_L$ et $q_x = 5 \ldots 100\,k_L$, nous obtenons alors des lois de puissance de la forme (13.44) dont les paramètres α et $A^{(1)}$ sont donnés au tableau 13.3. Ce modèle est représenté sur la figure 13.11 par les lignes droites en tirets.

L'exposant α est inférieur à 2 dans la gamme spectrale inférieure. Ceci implique que la rugosité mesurée σ_{mes} augmente lorsque l'on la mesure avec une plus haute résolution, mais à nombre fixe de points de mesure. En effet, nous pouvons approximer σ_{mes} par l'intégrale de la densité spectrale $\mathcal{P}^{(1)}(q_x)$ sur un intervalle $[q_{\mathrm{min}}, q_{\mathrm{max}}]$ de fréquences spatiales avec $q_{\mathrm{max}} \approx \pi/\delta x$, $q_{\mathrm{min}} = q_{\mathrm{max}}(2/N)$. Pour la loi de puissance (13.44), l'on obtient alors

$$\sigma_{\mathrm{mes}}^2(q_{\mathrm{min}}, q_{\mathrm{max}}) = \frac{A^{(1)}}{2\pi\, k_L^2 |2-\alpha|} \left(\frac{q_{\mathrm{max}}}{k_L}\right)^{2-\alpha} \left| 1 - \left(\frac{2}{N}\right)^{2-\alpha} \right|, \tag{13.49}$$

Surface	Intervalle $q_x = 0.05 \ldots 5\, k_L$ α	$A^{(1)}$	Intervalle $q_x = 5 \ldots 100\, k_L$ α	$A^{(1)}$
A	1.8	11×10^{-7}	3.0	46×10^{-7}
B	1.7	2×10^{-7}	2.5	7×10^{-7}

Tableau 13.3: Paramètres d'un modèle plus complexe pour la densité spectrale en une dimension, en utilisant des lois de puissance pour deux intervalles spectraux différents.

et cette expression augmente avec $q_{\max}$ si $\alpha < 2$. Ce comportement est apparent dans les deux premières colonnes du tableau 13.1. Par contre, lorsque l'on entre dans la gamme spectrale supérieure, l'exposant α est supérieur à 2. La situation se renverse alors et la rugosité décroît lorsque la résolution devient meilleure. Ceci correspond aux résultats des deux dernières colonnes du tableau 13.1.

Notons finalement que le modèle à deux exposants semble certes une meilleure représentation des spectres expérimentaux, mais qu'il est plus difficile de déterminer une densité spectrale en deux dimensions qui fournisse, par la relation (13.45), une loi de puissance à deux exposants pour $\mathcal{P}^{(1)}(q_x)$.

Conclusion

Le profil $s(\mathbf{R})$ d'une surface rugueuse peut être modélisé par un processus aléatoire. Dans l'hypothèse où la surface a une statistique gaussienne, ses propriétés statistiques sont caractérisées par sa fonction de corrélation ou bien sa densité spectrale.

Pour deux surfaces de verre utilisées dans les expériences de miroir à atomes à l'Institut d'Optique, la densité spectrale a été obtenue expérimentalement sur une grande gamme de fréquences spatiales, moyennant des mesures du profil de surface par un profilomètre optique et un microscope à force atomique. Les résultats expérimentaux montrent que la densité spectrale peut être modélisée de façon satisfaisante par une loi de puissance dont l'exposant (en deux dimensions) est situé entre 2 et 3.

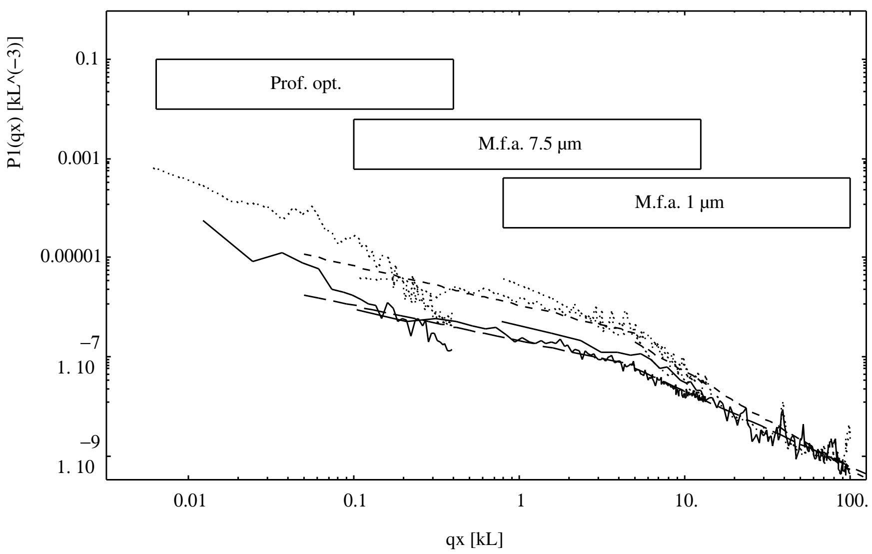

Figure 13.11: Modèle plus complexe pour la densité spectrale en une dimension, avec deux lois de puissance sur deux intervalles spectraux différents. La rupture de pente se situe à $q_x \approx 5\,k_L$.
Trait plein : surface A, pointillées : surface B (voir le tableau 13.2). Les tirets représentent les lois de puissance pour deux intervalles spectraux différents : $q_x = 0.05\ldots 5\,k_L$ et $q_x = 5\ldots 100\,k_L$.

Chapitre 14

Réflexion diffuse d'un champ scalaire par un miroir parfait rugueux

Introduction

Dans ce chapitre, nous introduisons quelques concepts fondamentaux pour caractériser la réflexion d'une onde par un miroir rugueux. Nous considérerons l'exemple concret d'un «miroir parfait rugueux», c'est-à-dire une barrière de potentiel infinie située sur une surface rugueuse. En optique lumineuse, ce problème correspond à la réflexion par une surface métallique [82]. Nous avons vu qu'un tel potentiel permet également de décrire la diffraction d'un atome par le miroir à onde évanescente dans le régime quantique (voir au chapitre 10). Dans la diffusion d'un atome par une surface cristalline, le modèle de la barrière de potentiel infinie et rugueuse est connu sous le nom du «mur dur rugueux» (*corrugated hard wall*) [74, 145, 146].

Comme nous décrivons la surface rugueuse par un modèle statistique, il est nécessaire d'étendre cette approche à la réflexion de l'onde. A cet effet, nous introduisons d'abord la distribution angulaire moyenne du champ diffusé, où la moyenne est prise par rapport à l'ensemble statistique pour la surface. Une probabilité de réflexion diffuse est définie qui permet de caractériser la spécularité de la réflexion. Ces notions sont illustrées à l'aide d'une solution approchée pour un miroir de faible rugosité, dans l'approximation de RAYLEIGH.

Ensuite, nous étudions la cohérence de la réflexion par le miroir rugueux. Nous considérons à cet effet des expériences d'interférométrie où le miroir rugueux intervient comme élément optique. Le contraste des franges d'interférence permet alors de mesurer la valeur moyenne du coefficient de réflexion en amplitude, d'une part, et la fonction de cohérence du champ réfléchi, d'autre part. Nous relions ces notions à la probabilité de réflexion diffuse et à la distribution angulaire moyenne du champ diffusé.

Dans ce chapitre, nous nous servirons du mot «champ» pour décrire à la fois une onde de matière ou un champ électromagnétique. Nous nous limitons également à l'approximation scalaire. En ce qui concerne la lumière, nous résumons dans l'annexe 15.B les résultats que l'on obtient en généralisant l'approximation de RAYLEIGH à la réflexion diffuse par une interface diélectrique rugueuse ; nous tenons alors également compte de la polarisation de l'onde lumineuse.

14.1 Réflexion diffuse

Dans ce paragraphe, nous allons étudier la réflexion diffuse du point de vue de la théorie de la diffusion : nous introduisons une probabilité différentielle de réflexion diffuse dont nous calculons la valeur moyenne par rapport à l'ensemble statistique pour le miroir rugueux.

14.1.1 Distribution angulaire du champ réfléchi

Dans l'espace libre $z \to +\infty$ au-dessus du miroir rugueux, le champ $\psi(\mathbf{r}) = \psi_{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \psi_{\text{réf}}(\mathbf{r})$ est la superposition d'une onde incidente $\psi_{\text{inc}}(\mathbf{r})$ et d'une onde réfléchie $\psi_{\text{réf}}(\mathbf{r})$ qui sont données par

$$z \to +\infty \ : \qquad \psi_{\text{inc}}(\mathbf{r}) = \exp\mathrm{i}\left(\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{R} - k_{zi}z\right) \tag{14.1}$$

et

$$z \to +\infty \ : \qquad \psi_{\text{réf}}(\mathbf{r}) = \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{K}_f}{(2\pi)^2} \tilde{\psi}_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f)\, \exp\mathrm{i}\left(\mathbf{K}_f \cdot \mathbf{R} + k_{zf}z\right). \tag{14.2}$$

Nous avons introduit le développement de FOURIER du champ réfléchi où les $\mathbf{K}_f$ dénotent les composantes du vecteur d'onde parallèles à la surface moyenne du miroir (le plan xOy). La composante normale k_{zf} du vecteur d'onde est fixée par l'équation de propagation libre (l'équation de HELMHOLTZ) à laquelle satisfait le champ dans l'espace au-dessus de la surface $s(\mathbf{R})$ du miroir

$$z > s(\mathbf{R}) \ : \qquad \left(\nabla^2 + k^2\right) \psi(\mathbf{r}) = 0 \tag{14.3}$$

où k est le module du vecteur d'onde dans le vide.[1] Nous avons donc

$$k_{zf} = +\sqrt{k^2 - \mathbf{K}_f^2}. \tag{14.4}$$

Le vecteur d'onde k_{zf} est positif parce que l'onde réfléchie se propage dans la direction des z croissants. Si le module de $\mathbf{K}_f$ est supérieur au vecteur d'onde k, la composante normale k_{zf} est imaginaire avec $\operatorname{Im} k_{zf} > 0$; ceci correspond à un mode évanescent du

[1]Le champ $\psi(\mathbf{r})$ est supposé monochromatique et un facteur temporel $\exp(-\mathrm{i}\omega t)$ est omis partout. Pour un champ lumineux, on a $k = \omega_L/c$, et pour une onde de matière : $k = \sqrt{2ME}/\hbar$.

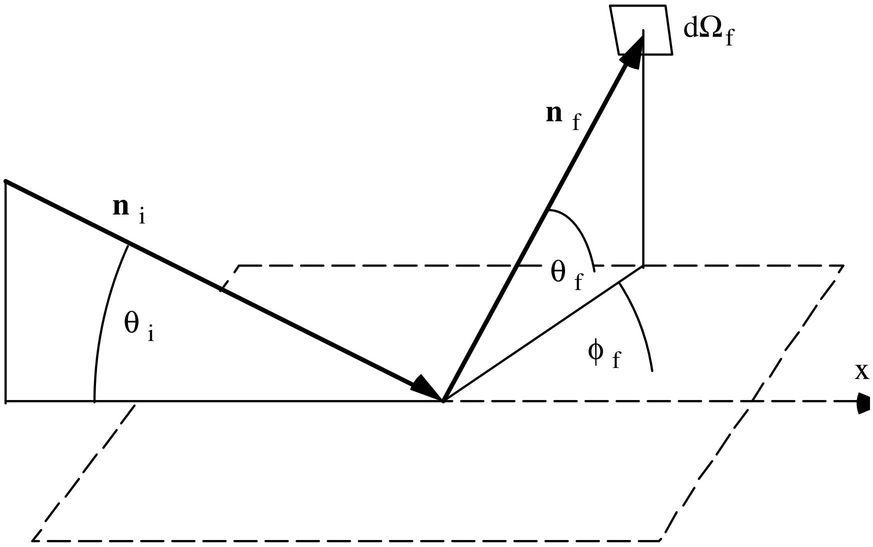

Figure 14.1: Angles de diffusion θ_f et ϕ_f.

champ réfléchi $\psi_{\text{réf}}(\mathbf{r})$. Le développement (14.2) généralise le développement asymptotique (7.12) que nous avons rencontré pour la diffraction, dans le cas d'un potentiel non périodique.[2]

Pour obtenir la distribution angulaire du champ diffusé («l'indicatrice de diffusion»), nous allons calculer le signal observé par un détecteur placé à l'infini dans une direction caractérisée par le vecteur unitaire $\mathbf{n}_f$ (voir la figure 14.1). Cette direction peut aussi être repérée par les angles θ_f et ϕ_f. Sans restriction de généralité, nous pouvons choisir l'axe Ox parallèle au vecteur d'onde incident $\mathbf{K}_i$.

Dans un élément d'angle solide $\mathrm{d}\Omega_f$ autour de $\mathbf{n}_f$, le détecteur observe un flux différentiel réfléchi $\mathrm{d}I_{\text{réf}}$ donné par

$$\mathrm{d}I_{\text{réf}}(\theta_f, \phi_f) = C \lim_{r\to\infty} \mathrm{Im} \left[\psi^*_{\text{réf}}(r\mathbf{n}_f)\frac{\partial}{\partial r}\psi_{\text{réf}}(r\mathbf{n}_f)\, r^2 \mathrm{d}\Omega_f\right] \tag{14.5}$$

où la constante de proportionnalité C dépend de la normalisation du champ. Il est bien connu que le développement de FOURIER (14.2) permet d'obtenir le champ lointain au point $r\mathbf{n}_f$ en évaluant l'intégrale sur $\mathbf{K}_f$ par la méthode de la phase stationnaire[3] : l'intégrale est dominée par le vecteur d'onde $\mathbf{K}_f$ fixé par la direction d'observation

$$\mathbf{k}_f = k\mathbf{n}_f \quad \text{ou} \quad \left\{ \begin{array}{lcl} k_{xf} &=& k\sin\theta_f\cos\phi_f \\ k_{yf} &=& k\sin\theta_f\sin\phi_f \\ k_{zf} &=& k\cos\theta_f, \end{array} \right. \tag{14.6}$$

[2] Pour des questions de normalisation, nous allons parfois limiter la surface du miroir à un carré fini d'aire L^2. En utilisant des conditions aux limites périodiques, l'intégrale sur $\mathbf{K}_f$ dans le développement de FOURIER (14.2) devient alors une somme sur les vecteurs d'onde discrets $\mathbf{K}_{n_x,n_y} = \mathbf{K}_i + \mathbf{Q}_{n_x,n_y}$, comme à l'équation (13.18), où les $\mathbf{Q}_{n_x,n_y}$ sont donnés par (13.19).

[3] M. NIETO-VESPERINAS, *Scattering and Diffraction in Physical Optics*, chap. 2.8.

et on trouve alors une onde sphérique

$$r \to \infty : \qquad \psi_{\text{réf}}(r\mathbf{n}_f) = -\frac{\mathrm{i}k_{zf}}{2\pi}\tilde{\psi}_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}. \tag{14.7}$$

Ici, la composante normale k_{zf} du vecteur d'onde final est réelle, les ondes évanescentes en effet ne contribuent pas au champ à l'infini.

Le développement asymptotique (14.7) permet donc d'exprimer le flux différentiel réfléchi par les amplitudes de FOURIER du champ :

$$\frac{\mathrm{d}I_{\text{réf}}}{\mathrm{d}\Omega_f} = C\frac{k\,k_{zf}^2}{(2\pi)^2}\left|\tilde{\psi}_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f)\right|^2. \tag{14.8}$$

Pour obtenir une *probabilité différentielle de réflexion* $\mathrm{d}w/\mathrm{d}\Omega_f$, l'on considère un miroir avec une surface finie L^2 et l'on normalise le flux réfléchi par le flux de l'onde incidente (14.1) $I_{\text{inc}} = Ck_{zi}L^2$:

$$\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\Omega_f} = \frac{1}{I_{\text{inc}}}\frac{\mathrm{d}I_{\text{réf}}}{\mathrm{d}\Omega_f} = \frac{k}{(2\pi L)^2}\frac{k_{zf}^2}{k_{zi}}\left|\tilde{\psi}_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f)\right|^2. \tag{14.9}$$

Il est commode d'exprimer la probabilité différentielle $\mathrm{d}w$ non pas par élément d'angle solide $\mathrm{d}\Omega_f$, mais par élément de vecteur d'onde final $\mathrm{d}\mathbf{K}_f$. Ceci revient au changement de variable

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\mathbf{K}_f &= |\mathbf{K}_f|\,\mathrm{d}|\mathbf{K}_f|\,\mathrm{d}\phi_f = k^2\sin\theta_f\,\mathrm{d}\sin\theta_f\,\mathrm{d}\phi_f = \\ &= k\,k_{zf}\,\mathrm{d}\Omega_f. \end{aligned} \tag{14.10}$$

Nous obtenons ainsi

$$\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f} = \frac{1}{(2\pi L)^2}\frac{k_{zf}}{k_{zi}}\left|\tilde{\psi}_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f)\right|^2. \tag{14.11}$$

Par abus de langage, nous appelerons cette expression la *distribution angulaire du champ réfléchi.*

Remarque. Si nous considérons une surface périodique (un réseau de diffraction), l'amplitude de FOURIER $\tilde{\psi}_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f)$ du développement (14.2) est piquée aux vecteurs d'ondes diffractés $\mathbf{K}_n = \mathbf{K}_i + \mathbf{G}_n$ (les $\mathbf{G}_n$ sont les vecteurs d'onde du réseau réciproque) :

$$\tilde{\psi}_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f) = (2\pi)^2\sum_n a_n\,\delta(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_n).$$

La distribution du flux réfléchi (14.11) est alors donnée par

$$\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f} = \sum_n \frac{k_{zf}}{k_{zi}}|a_n|^2\;\delta(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_n),$$

où nous nous sommes servi de l'aire finie L^2 du miroir pour régulariser les carrés des fonctions δ. La distribution $\mathrm{d}w/\mathrm{d}\mathbf{K}_f$ est également piquée aux vecteurs d'onde diffractés, et les poids des pics de diffraction sont donnés par les populations des ordres $w_n = (k_{zf}/k_{zi})|a_n|^2$ (7.17).

14.1.2 Moyenne statistique

Les amplitudes de FOURIER $\tilde{\psi}_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f)$ du champ réfléchi dépendront du profil de surface $s(\mathbf{R})$ du miroir rugueux. Dans notre approche statistique, elles sont donc également des quantités aléatoires et nous allons calculer la *valeur moyenne* $\langle \mathrm{d}w/\mathrm{d}\mathbf{K}_f \rangle$ de la probabilité différentielle que nous venons d'introduire. Formellement, cette quantité représente la distribution du champ réflechi après avoir moyenné sur un grand nombre de réalisations du miroir rugueux. Dans la pratique, $\langle \mathrm{d}w/\mathrm{d}\mathbf{K}_f \rangle$ peut décrire la distribution réflechie par une réalisation particulière du miroir si la rugosité est ergodique et que l'on introduise expérimentalement une moyenne appropriée. Pour un faisceau incident collimaté, on peut par exemple faire varier la position d'impact sur le miroir et moyenner les distributions diffusées. Une autre possibilité est que l'onde incidente contient un grand nombre de composantes incohérentes qui sont réfléchies de façon indépendante et sur lesquelles l'on moyenne lors de la détection. Ce cas se présente en optique lorsque l'on utilise la lumière naturelle, et en optique atomique pour un gaz d'atomes dilué et non dégénéré.

14.1.3 Calcul du champ réfléchi

A titre d'illustration, nous calculons maintenant les amplitudes de FOURIER $\tilde{\psi}_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f)$ du champ réfléchi dans l'approximation de RAYLEIGH. Elles sont déterminées par la condition que le champ s'annule sur la surface $z = s(\mathbf{R})$ du miroir parfait :

$$\psi[\mathbf{R}, s(\mathbf{R})] = 0. \tag{14.12}$$

Le modèle du miroir parfait rugueux apparaît dans des situations physiques très différentes : en optique, pour un miroir métallique, en mécanique quantique, pour une barrière de potentiel infinie, et aussi en acoustique [133, 117]. Par conséquent, il existe des méthodes diverses pour résoudre ce problème parmi lesquels nous citons l'approximation de RAYLEIGH [133] et l'approximation de KIRCHHOFF [83, 74] ; Une formulation exacte basée sur le théorème d'extinction[4] est due à G. ARMAND [145] ; des conditions aux limites linéarisées ont été étudiées par H. OGURA et N. TAKAHASHI [147], et D. P. WINEBRENNER et A. ISHIMARU ont développé une approche perturbative par rapport à la phase du champ [117, 118], suite aux travaux de SHEN et MARADUDIN [116].

Nous allons choisir ici l'approche de RAYLEIGH que nous avons déjà utilisée au chapitre 10. Rappelons qu'elle suppose que les développements asymptotiques (14.1, 14.2) pour les ondes incidente et réfléchie décrivent le champ jusqu'à la surface $z = s(\mathbf{R})$. La condition aux limites (14.12) donne alors l'équation suivante pour les amplitudes de FOURIER $\tilde{\psi}_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f)$

$$\int \frac{\mathrm{d}\mathbf{K}_f}{(2\pi)^2}\, \tilde{\psi}_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f)\, \exp \mathrm{i}\left[(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i)\mathbf{R} + (k_{zf} + k_{zi}) s(\mathbf{R})\right] + 1 = 0, \tag{14.13}$$

[4] M. BORN et E. WOLF, *op. cit.*, chap. 2.4.

qui est la généralisation de (10.9) pour un miroir non périodique.

Pour résoudre (14.13), nous supposons que les variations du profil de surface $s(\mathbf{R})$ sont faibles devant la longueur d'onde $2\pi/k$ du champ. Comme au chapitre 10, nous développons donc le champ jusqu'au premier ordre inclus par rapport au profil, et nous obtenons alors

$$\tilde{\psi}^{(0)}_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f) = -(2\pi)^2\delta(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i), \tag{14.14a}$$

$$\tilde{\psi}^{(1)}_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f) = +2\mathrm{i}k_{zi}S(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i), \tag{14.14b}$$

où $S(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i)$ est la transformée de FOURIER du profil de surface [voir (13.16)]. Les exposants $(0), (1)$ dénotent l'ordre dans le développement perturbatif.

Nous constatons qu'au premier ordre, le champ diffusé (14.14b) est proportionnel à la composante de FOURIER $S(\mathbf{Q})$ du profil de surface pour le transfert de vecteur d'onde $\mathbf{Q} \equiv \mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i$. Nous pouvons donc interpréter la réflexion diffuse comme la diffraction du champ incident par les réseaux que forment les composantes de FOURIER du miroir avec les périodes $2\pi/|\mathbf{Q}|$.

Remarque. Pour référence ultérieure, donnons encore l'amplitude de FOURIER que l'on obtient en poussant le développement de RAYLEIGH jusqu'au deuxième ordre par rapport au profil de surface :

$$\tilde{\psi}^{(2)}_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f) = +2k_{zi}\int \frac{\mathrm{d}\mathbf{K}'}{(2\pi)^2}\, k'_z S(\mathbf{K}' - \mathbf{K}_i)\, S^*(\mathbf{K}' - \mathbf{K}_f) \tag{14.14c}$$

Dans (14.14c), le vecteur d'onde k'_z est relié à $\mathbf{K}'$ par (14.4).

14.1.4 Etude de la distribution angulaire réfléchie

Pic spéculaire et fond diffus

Le résultat (14.14a, b) pour les amplitudes de FOURIER du champ permet d'écrire la probabilité différentielle de réflexion (14.11) comme la somme de deux termes

$$\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f} = \left.\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f}\right|_{\text{spéc}} + \left.\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f}\right|_{\text{diff}}. \tag{14.15a}$$

Le premier représente le «pic spéculaire»,

$$\left.\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f}\right|_{\text{spéc}} = \delta(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i) \tag{14.15b}$$

qui est une fonction δ, et le deuxième un «fond diffus»

$$\left.\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f}\right|_{\text{diff}} = \frac{4k_{zi}k_{zf}}{(2\pi L)^2}\,|S(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i)|^2 \tag{14.15c}$$

qui varie de façon continue avec le vecteur d'onde final et qui fait intervenir la transformée de FOURIER du profil de surface. Dans la limite d'une rugosité faible de sorte que le calcul au premier ordre est justifié, une mesure de la distribution diffuse du champ réfléchi par le miroir donne donc accès au module de la transformée de FOURIER de la rugosité de surface. Cette relation est d'ailleurs un résultat bien connu de la théorie de la diffusion. Dans le contexte présent, (14.15c) est à la base de la caractérisation de la qualité de surface par diffusion de lumière (voir [61, 60, 143] pour davantage de références).

Distribution moyenne

En prenant la valeur moyenne de la probabilité (14.15) par rapport à l'ensemble statistique pour la surface rugueuse, et en utilisant (13.34) pour la valeur moyenne des carrés des amplitudes de FOURIER $S(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i)$, nous obtenons la distribution moyenne du champ diffusé

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f} \right\rangle = \left\langle \left. \frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f} \right|_{\text{spéc}} \right\rangle + \left\langle \left. \frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f} \right|_{\text{diff}} \right\rangle . \tag{14.16}$$

Sa partie spéculaire est encore une fonction δ, comme en (14.15b), et sa partie diffuse est donnée par

$$\left\langle \left. \frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f} \right|_{\text{diff}} \right\rangle = \frac{4k_{zi}k_{zf}}{(2\pi)^2} \mathcal{P}_s(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i), \tag{14.17}$$

où $\mathcal{P}_s(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i)$ est la densité spectrale de la rugosité.

Sur la figure 14.2, nous représentons la partie diffuse de la distribution (14.17) en fonction de l'angle θ_f, pour le cas de l'incidence normale ($\theta_i = 0$). La courbe en tirets correspond à une densité spectrale qui est un « bruit blanc », et celle en trait plein à une loi de puissance (13.30) avec un exposant $\alpha = 3$ et une coupure aux basses fréquences $\Lambda = 0.01\,k$. Pour les deux densités spectrales, la rugosité prend la même valeur $\sigma = 0.5/k$ après intégration sur l'intervalle spectral $|\mathbf{Q}| = 0.01\,k \ldots k$.

Probabilité de réflexion diffuse

Pour caractériser la « spécularité » de la réflexion par le miroir rugueux, il est naturel d'introduire une *probabilité totale de réflexion diffuse* : elle est définie comme l'intégrale sur la partie diffuse (14.15c) de la distribution moyenne du champ réfléchi :

$$w_{\text{diff}} \equiv \int\limits_{|\mathbf{K}_f|<k} \mathrm{d}\mathbf{K}_f \left\langle \left. \frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f} \right|_{\text{diff}} \right\rangle . \tag{14.18}$$

L'intégrale ne porte que sur les ondes diffusées homogènes qui se propagent dans l'espace libre au-dessus du miroir.

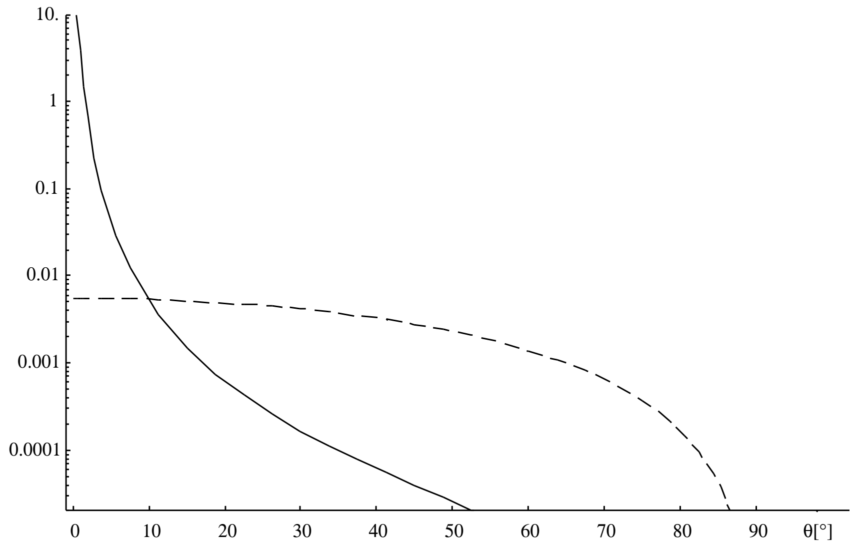

Figure 14.2: Distribution angulaire moyenne (14.17) réfléchie par un miroir parfait rugueux, pour l'incidence normale, en fonction de θ_f. Le pic spéculaire a été supprimé sur la figure. La distribution est donnée en $(\,^\circ)^{-1}$.
Trait plein : densité spectrale en loi de puissance, tirets : densité spectrale constante. Les paramètres sont donnés dans le texte.

En utilisant le résultat (14.17), nous pouvons écrire la probabilité de réflexion diffuse (14.18) sous la forme [148]

$$w_{\text{diff}} = (2k_{zi}\sigma_{\text{eff}})^2 = \left(4\pi \cos\theta_i \frac{\sigma_{\text{eff}}}{\lambda}\right)^2 \tag{14.19}$$

où la *rugosité effective* σ_{eff} est donnée par l'intégrale

$$\sigma^2_{\text{eff}}(\theta_i, k) = \int\limits_{|\mathbf{K}_f|<k} \frac{\mathrm{d}\mathbf{K}_f}{(2\pi)^2} \frac{\cos\theta_f}{\cos\theta_i} \mathcal{P}_s(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i), \tag{14.20}$$

et $\lambda = 2\pi/k$ est la longueur d'onde du champ dans le vide. La rugosité effective σ_{eff} caractérise la non-spécularité de la réflexion sur le miroir rugueux : si elle est beaucoup plus petite que la longueur d'onde du champ incident, la réflexion est quasiment spéculaire [voir (14.19)]. Les amplitudes de FOURIER non spéculaires $\tilde{\psi}(\mathbf{K}_f)$ ($\mathbf{K}_f \neq \mathbf{K}_i$) sont alors beaucoup plus petites que l'amplitude spéculaire $\tilde{\psi}(\mathbf{K}_i)$ [voir (14.14a,b)]. Si par contre la rugosité effective est du même ordre que λ, une fraction importante du flux incident est réfléchie de façon diffuse. En incidence rasante cependant, une réflexion spéculaire est possible même si $\sigma_{\text{eff}} > \lambda$ parce que la composante normale k_{zi} du vecteur d'onde incident diminue proportionnellement à $\cos\theta_i$. Physiquement, ceci correspond à l'effet de perspective qui réduit la rugosité du miroir,

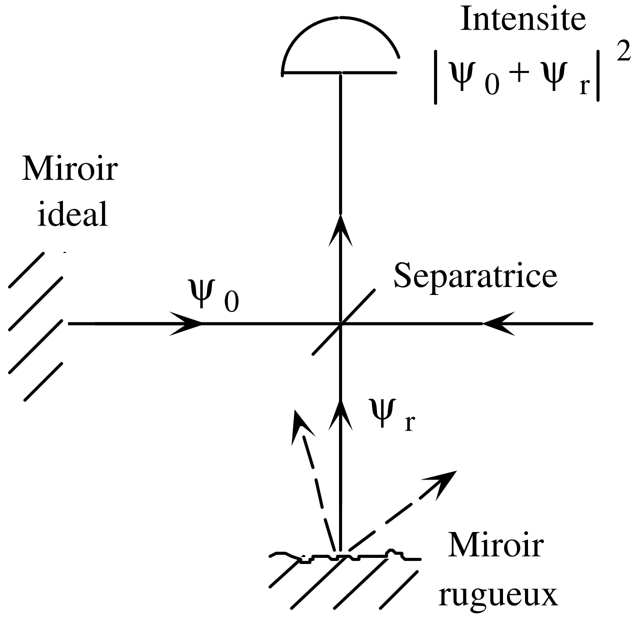

Figure 14.3: Interféromètre avec un miroir rugueux comme élément optique.

vue de la direction d'incidence. Du point de vue théorique, la rugosité effective fixe l'échelle pour la rugosité du miroir à partir de laquelle le développement perturbatif pour la diffusion du champ n'est plus valable. En effet, si le résultat (14.19) devient supérieur à l'unité, il n'est plus possible d'interpréter w_{diff} comme une probabilité de réflexion non spéculaire.

En ce qui concerne une mesure de rugosité par diffusion optique, la rugosité effective σ_{eff} donne une bonne approximation de la «vraie» rugosité σ dans l'intervalle spectral $|\mathbf{Q}| \lesssim k_L$. Notons néanmoins qu'en général, la rugosité effective $\sigma_{\text{eff}}(\theta_i, k)$ (14.20) dépend de l'angle d'incidence θ_i et du vecteur d'onde k du champ.

14.2 La cohérence du champ réfléchi

Nous étudions maintenant le miroir parfait rugueux du point de vue de la cohérence du champ réfléchi. Au lieu de raisonner en termes d'une probabilité de diffusion comme au paragraphe 14.1 précédent, nous allons considérer ici des mesures interférométriques du champ réfléchi. Ceci nous amènera d'abord à étudier le coefficient moyen de réflexion en amplitude et ensuite, de façon plus générale, la fonction de cohérence du champ réfléchi.

14.2.1 Le coefficient de réflexion moyen

Interférométrie avec un miroir rugueux

Considérons un interféromètre comme celui de la figure 14.3 qui contient le miroir rugueux dans un des bras et où le champ réfléchi ψ_r interfère avec un champ de référence ψ_0. Le signal mesuré par l'interféromètre est alors proportionnel à

$$|\psi_0 + \psi_r|^2 = |\psi_0|^2 + |\psi_r|^2 + 2\mathrm{Re}\,\psi_0^*\,\psi_r. \tag{14.21}$$

C'est le dernier terme dans cette expression qui donne lieu aux franges d'interférence. A cause de la rugosité du miroir, l'amplitude et la phase du champ réfléchi ψ_r varient d'une réalisation à une autre du miroir. Par conséquent, l'amplitude et la position des franges fluctuent et la valeur moyenne de leur amplitude diminue. Ceci est exprimé de façon quantitative par le *contraste* des franges $\mathcal{A}$ (leur *visibilité*) dont la définition est

$$\mathcal{A} \equiv 2\frac{|\psi_0|\,|\langle\psi_r\rangle|}{|\psi_0|^2 + \langle|\psi_r|^2\rangle}. \tag{14.22}$$

Le contraste d'un tel interféromètre donne donc accès à la valeur moyenne $\langle\psi_r\rangle$ de l'amplitude du champ réfléchi, par opposition à la distribution angulaire moyenne qui ne contient que des probabilités de diffusion.

Amplitude spéculaire réfléchie

Calculons maintenant le *coefficient de réflexion spéculaire en amplitude* $r_{\text{spéc}}$. Il est défini par le développement asymptotique (pour $z \to +\infty$)

$$\psi(\mathbf{r}) = \left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_{zi}z} + r_{\text{spéc}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_{zi}z}\right)\exp\mathrm{i}\mathbf{K}_i\cdot\mathbf{R} + \{\text{ondes non spéculaires}\}, \tag{14.23}$$

et il est évident que $r_{\text{spéc}}$ est proportionnel à l'amplitude de FOURIER spéculaire $\tilde{\psi}(\mathbf{K}_i)$. Pour la normaliser, nous rappelons que pour un miroir parfait et plan situé à $z = 0$, nous avons $r_{\text{spéc}} = -1$. L'approximation de RAYLEIGH (14.14) permet d'obtenir ce résultat si nous limitons le miroir à une taille finie L^2. Le développement de FOURIER (14.2) devient alors une somme discrète sur les vecteurs d'onde diffusés [voir (13.18)], et le terme spéculaire dans cette somme donne le coefficient de réflexion $r_{\text{spéc}}$. Jusqu'au deuxième ordre en $S(\mathbf{Q})$ inclus, nous trouvons ainsi

$$r_{\text{spéc}} = -1 + \mathrm{i}\frac{2k_{zi}S(\mathbf{0})}{L^2} + 2k_{zi}\int\frac{\mathrm{d}\mathbf{K}_f}{(2\pi L)^2}\,k_{zf}\,|S(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i)|^2\,. \tag{14.24}$$

Au premier ordre en $S(\mathbf{Q})$, nous trouvons que le champ réfléchi est déphasé de $\delta\varphi = -2k_{zi}\delta z$, où le déplacement moyen de la position du miroir vaut $\delta z = S(\mathbf{0})/L^2$. Ici intervient la surface entière du miroir parce que nous considérons une onde plane incidente qui s'étend sur tout le plan xOy. Finalement, le terme du deuxième ordre en (14.24) tient compte de la diminution de l'intensité spéculaire à cause de la réflexion diffuse. En effet, la valeur moyenne du coefficient de réflexion en intensité vaut, à l'ordre le plus bas par rapport à la rugosité du miroir,

$$R_{\text{spéc}} = \left\langle |r_{\text{spéc}}|^2 \right\rangle = 1 - w_{\text{diff}} \tag{14.25}$$

où la probabilité de réflexion diffuse w_{diff} (14.19) apparaît comme un coefficient de perte de l'intensité spéculaire.

Considérons finalement un interféromètre équilibré où l'onde réfléchie spéculairement et l'onde de référence ont la même intensité. Le contraste $\mathcal{A}$ de la figure d'interférence (14.22) est alors donné par la valeur moyenne de l'amplitude spéculaire ; et le résultat (14.24) implique

$$\mathcal{A} = |\langle r_{\text{spéc}} \rangle| = 1 - \tfrac{1}{2} w_{\text{diff}} = 1 - 2k_{zi}^2 \sigma_{\text{eff}}^2, \tag{14.26}$$

où nous avons utilisé la rugosité effective σ_{eff} définie en (14.20). La réflexion diffuse réduit donc le contraste de la figure d'interférence que l'on obtient avec le miroir rugueux. Du point de vue de la théorie de la diffusion, ceci est dû aux ondes non spéculaires qui ne contribuent pas, en moyenne, à la figure d'interférence. Au paragraphe suivant, nous interprétons ce même phénomène par les fluctuations de phase du champ réfléchi.

Facteur de DEBYE–WALLER

Nous présentons ici un calcul alternatif du coefficient de réflexion moyen. Supposons qu'à chaque position $\mathbf{R}$ dans la surface, le champ incident soit réfléchi spéculairement avec un coefficient de réflexion en amplitude $-\exp[-2\mathrm{i}k_{zi}s(\mathbf{R})]$ qui rend compte du déphasage dû au profil du miroir. Le coefficient de réflexion spéculaire est alors donné par la somme sur tous les points de la surface :

$$r_{\text{spéc}} = -\frac{1}{L^2} \int \mathrm{d}\mathbf{R}\, \exp[-2\mathrm{i}k_{zi}s(\mathbf{R})]\,. \tag{14.27}$$

A travers la surface du miroir, la phase de l'onde réfléchie présente donc des fluctuations de sorte que la valeur moyenne du coefficient de réflexion en amplitude diminue.

Un phénomène physique similaire a été étudié par P. DEBYE en 1914 dans le contexte de la diffraction des rayons X par un cristal à température non nulle [149]. A cause du mouvement thermique, les ondes partielles rayonnées par les centres diffuseurs du cristal sont déphasées d'une quantité $\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}_i$ où $\mathbf{q}$ est le transfert de vecteur d'onde et $\mathbf{u}_i$ le déplacement du $i$ème centre diffuseur par rapport à sa position d'équilibre. Il faut alors moyenner sur le mouvement des centres diffuseurs dans le temps, et l'on trouve que l'amplitude diffusée est donnée par le facteur de DEBYE–WALLER

$$\langle \exp \mathrm{i}\mathbf{q} \cdot \mathbf{u_i} \rangle = \exp(-\mathcal{W}_{\text{DW}}). \tag{14.28}$$

Dans grand nombre de cas, la statistique des déplacements $\mathbf{u}_i$ est gaussienne si bien que l'exposant de DEBYE–WALLER vaut $\mathcal{W}_{\text{DW}} = \frac{1}{2}\mathbf{q}^2\langle \mathbf{u}_i^2 \rangle$ [149, 84]. Il permet alors de mesurer la fréquence des oscillations des centres diffuseurs, ainsi que la température du cristal [150].

Dans le cas du miroir rugueux, le transfert de vecteur d'onde au champ réfléchi vaut $q = 2k_{zi}$. A partir de l'expression (14.27), la fonction caractéristique (13.6) pour la variable aléatoire $s(\mathbf{R})$ permet alors d'obtenir un résultat analogue à (14.28) pour le coefficient de réflexion moyen [148]

$$\langle r_{\text{spéc}} \rangle = -\exp\Big(-2k_{zi}^2\sigma^2\Big)\,. \tag{14.29}$$

Nous constatons que cette expression est la généralisation du coefficient de réflexion moyen (14.26) que nous avons trouvé à la limite de faible rugosité, à ceci près que la rugosité effective σ_{eff} a été remplacé dans (14.29) par la rugosité σ. L'on peut démontrer par une approche plus précise [116, 151] que celle que nous avons suivie ici, que le coefficient moyen de réflexion spéculaire est en effet de la forme exponentielle (14.29), et qu'il fait intervenir la rugosité effective : $\langle r_{\text{spéc}} \rangle = \exp(-2k_{zi}^2\sigma_{\text{eff}}^2)$. A la limite d'une rugosité effective grande devant la longueur d'onde du champ, la probabilité de réflexion spéculaire est donc exponentiellement petite.

14.2.2 La fonction de cohérence

Définition

Pour caractériser la cohérence du champ réfléchi par le miroir rugueux, imaginons une expérience analogue aux fentes de YOUNG (voir la figure 14.4) : soit un écran avec deux trous situés aux positions $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$ dans le champ réfléchi. L'on observe la figure d'interférence créée par le champ rayonné par les deux trous. Pour effectuer la moyenne sur les réalisations du miroir rugueux, une possibilité est de déplacer rapidement le miroir dans le plan xOy et de détecter une moyenne temporelle de la figure d'interférence. La cohérence du champ est alors déterminée par le contraste des franges de la figure d'interférence moyennée, lorsque l'on fait varier les positions $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$. En particulier, l'on s'attend à ce que le contraste chute lorsque les deux trous sont très loin l'un de l'autre parce que les fluctuations du champ réfléchi ont alors détruit toute relation de phase entre les amplitudes $\psi_{\text{réf}}(\mathbf{r})$ et $\psi_{\text{réf}}(\mathbf{r}')$ du champ. La distance caractéristique entre les points $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$ pour laquelle le contraste des franges disparaît, définit alors la *longueur de cohérence* ℓ_{coh} du champ réfléchi par le miroir.

Comme à l'équation (14.22), le terme d'interférence dans le signal mesuré est proportionnel au produit $\psi_{\text{réf}}^*(\mathbf{r})\,\psi_{\text{réf}}(\mathbf{r}')$, à un facteur de phase près qui dépend de la différence de chemin entre $\mathbf{r}$, $\mathbf{r}'$ et le point d'observation P (voir la figure 14.4). En supposant que la rugosité du miroir est ergodique, nous pouvons identifier la moyenne sur les déplacements du miroir et la moyenne statistique sur les réalisations du miroir. Le contraste des franges d'interférence est alors proportionnel à la quantité

$$\Gamma(\mathbf{r},\mathbf{r}') \equiv \langle \psi_{\text{réf}}^*(\mathbf{r})\,\psi_{\text{réf}}(\mathbf{r}')\rangle\,, \tag{14.30}$$

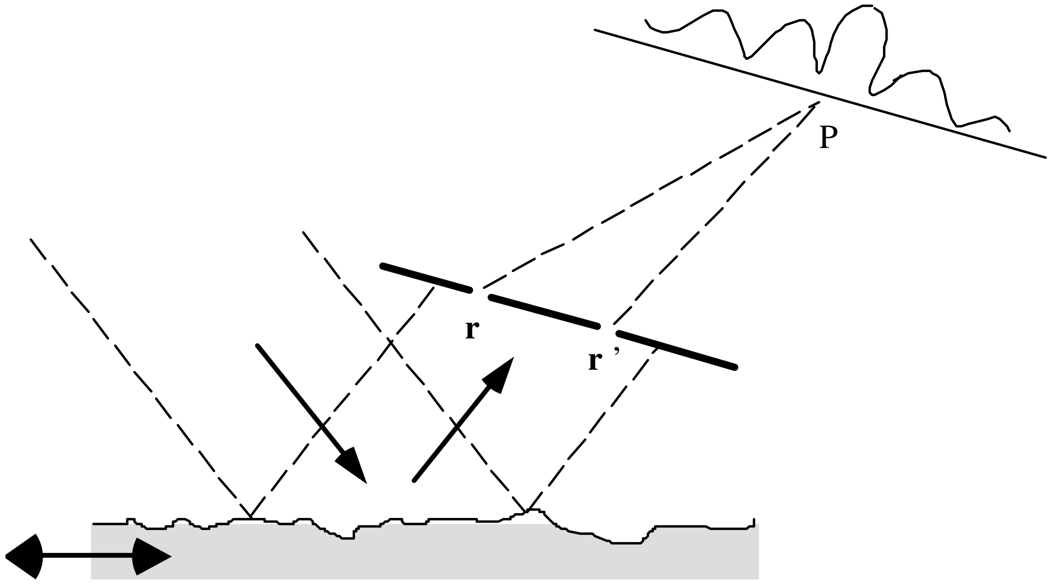

Figure 14.4: Schéma d'une expérience qui permet de mesurer la fonction de cohérence $\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. *Afin d'effectuer une moyenne sur les réalisations du miroir rugueux, l'on déplace rapidement le miroir parallèlement à sa surface moyenne.*

qui définit la *fonction de cohérence* du champ réfléchi [54]. En normalisant la fonction de cohérence, nous obtenons le *degré complexe de cohérence*

$$\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\left[\langle|\psi_{\text{réf}}(\mathbf{r})|^2\rangle\langle|\psi_{\text{réf}}(\mathbf{r}')|^2\rangle\right]^{1/2}}. \tag{14.31}$$

Par sa définition, le degré complexe de cohérence est égal à l'unité si les positions $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$ se confondent.

Nous notons l'analogie aux fonctions de corrélation : en effet, si nous interprétons le champ $\psi_{\text{réf}}(\mathbf{r})$ comme un processus aléatoire complexe, la fonction de cohérence (14.30) en est une fonction de corrélation à deux points, et sa longueur de cohérence correspond précisément à la longueur de corrélation.

Relation à la distribution moyenne

Nous montrons maintenant que la fonction de cohérence contient la même information que la distribution moyenne du flux réfléchi.

En utilisant le développement de FOURIER (14.2) du champ réfléchi, la fonction de cohérence peut s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned}\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \frac{\mathrm{d}\mathbf{K}'}{(2\pi)^2} \left\langle \tilde{\psi}^*_{\text{réf}}(\mathbf{K})\, \tilde{\psi}_{\text{réf}}(\mathbf{K}') \right\rangle \times \\ &\qquad \times \exp \mathrm{i}\left(\mathbf{K}' \cdot \mathbf{R}' - \mathbf{K} \cdot \mathbf{R} + k_z z - k'^*_z z'\right). \end{aligned} \tag{14.32}$$

Si l'onde incidente est une onde plane et que la rugosité du miroir est statistiquement invariante par translation, les différents vecteurs d'onde du champ réfléchi ne sont pas corrélés entre eux, et la valeur moyenne dans (14.32) vaut

$$\left\langle \tilde{\psi}^*_{\text{réf}}(\mathbf{K})\, \tilde{\psi}_{\text{réf}}(\mathbf{K}')\right\rangle = (2\pi)^2\, \delta(\mathbf{K}' - \mathbf{K})\, \rho_{\text{réf}}(\mathbf{K}), \tag{14.33}$$

où $\rho_{\text{réf}}(\mathbf{K})$ est la distribution moyenne des vecteurs d'onde du champ réfléchi. Notons que (14.33) fait écho à la relation (13.21) entre la fonction de corrélation des amplitudes de FOURIER $S(\mathbf{Q})$ de la rugosité et la densité spectrale $\mathcal{P}_s(\mathbf{Q})$. La fonction de cohérence est donc la transformée de FOURIER de la distribution moyenne des vecteurs d'onde réfléchis :

$$\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{K}}{(2\pi)^2}\, \rho_{\text{réf}}(\mathbf{K}) \exp \mathrm{i} \left[\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{R}) + k_z z' - k_z^* z'\right], \tag{14.34}$$

un résultat qui correspond encore une fois au théorème de WIENER–KHINTCHINE. Nous observons en outre la relation suivante entre la distribution moyenne $\rho_{\text{réf}}(\mathbf{K})$ et la probabilité moyenne de réflexion diffuse (14.17)

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f} \right\rangle = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{k_{zf}}{k_{zi}} \rho_{\text{réf}}(\mathbf{K}_f). \tag{14.35}$$

A titre d'illustration, calculons la fonction de cohérence pour le miroir parfait à faible rugosité. La distribution angulaire moyenne du champ diffusé (14.16) et la relation (14.34) donnent alors la fonction de cohérence sous la forme suivante : elle est une somme de deux termes,

$$\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Gamma_{\text{coh}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \Gamma_{\text{incoh}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \tag{14.36a}$$

où le premier terme «cohérent» provient du pic spéculaire de la distribution $\langle \mathrm{d}w/\mathrm{d}\mathbf{K}_f \rangle$ (14.16)

$$\Gamma_{\text{coh}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \exp \mathrm{i} \left[\mathbf{K}_i \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{R}) + k_{zi}(z' - z)\right] \;; \tag{14.36b}$$

cette partie de la fonction de cohérence correspond à une longueur de cohérence infinie. Le fait que le miroir rugueux ne détruit pas forcément les franges d'interférence est un résultat caractéristique pour la théorie ondulatoire. On obtient en effet un résultat différent d'un point de vue classique : les irrégularités de la surface du miroir, aussi infimes qu'elles soient, font dévier une particule incidente de sorte qu'elle ne sera pas réfléchie dans la direction spéculaire.

Le deuxième terme «incohérent» dans (14.36a) correspond à la partie diffuse de la distribution (14.16) :

$$\Gamma_{\text{incoh}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 4k_{zi}^2 \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{K}_f}{(2\pi)^2} \mathcal{P}_s(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i)\, \exp \mathrm{i} \left[\mathbf{K}_f \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{R}) + k_{zf} z' - k_{zf}^* z\right]. \tag{14.36c}$$

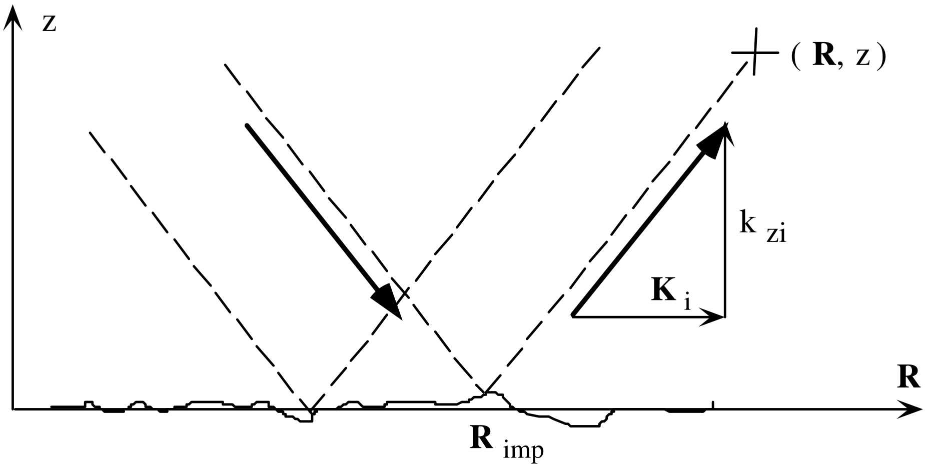

Figure 14.5: Construction pour la position d'impact $\mathbf{R}_{\text{imp}}$ *(14.39).*

Nous notons qu'à hauteur fixe et loin du miroir, $z' = z \to +\infty$, la partie incohérente de la fonction de cohérence est approximativement proportionnelle à la fonction de corrélation de la surface rugueuse[5]

$$\Gamma_{\text{incoh}}(\mathbf{R}, z\,;\, \mathbf{R}', z) \simeq 4k_{zi}^2\, C_s(\mathbf{R}' - \mathbf{R})\,; \tag{14.37}$$

la longueur de cohérence du champ diffusé est donc égale à la longueur de corrélation de la surface rugueuse.

Exemple pour un modèle simple

Nous allons montrer comment l'on peut obtenir la distribution du champ réfléchi à partir d'un calcul direct de la fonction de cohérence. Notre description est complémentaire de la méthode de RAYLEIGH, nous suivons en effet une version «naïve» de l'approche de KIRCHHOFF qui a été utilisée, par exemple, par M. V. BERRY [83].

Nous supposons que le champ réfléchi $\psi_{\text{réf}}(\mathbf{r})$ s'écrit

$$\psi_{\text{réf}}(\mathbf{r}) = \exp \mathrm{i}\,[\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{R} + k_{zi}(z - 2s(\mathbf{R}_{\text{imp}}))]\,. \tag{14.38}$$

Dans ce modèle, la rugosité du miroir rugueux déforme le front d'onde de l'onde réfléchie spéculairement par un déphasage $-2k_{zi}s(\mathbf{R}_{\text{imp}})$ où $\mathbf{R}_{\text{imp}}$ est la «position d'impact»

$$\mathbf{R}_{\text{imp}} = \mathbf{R} - z\frac{\mathbf{K}_i}{k_{zi}} \tag{14.39}$$

dont la signification géométrique est illustrée sur la figure 14.5.

[5] L'expression (14.37) est exacte si la plage de fréquences spatiales $\mathbf{Q} = \mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i$ qui excitent des ondes diffusées évanescentes (avec k_{zf} imaginaire) donne une contribution négligeable à la densité spectrale $\mathcal{P}_s(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i)$.

A partir du modèle (14.38) du champ réfléchi, nous pouvons calculer la fonction de cohérence «transverse» $\Gamma(\mathbf{R}, z\,;\,\mathbf{R}', z)$ à une hauteur z fixe loin du miroir. En utilisant la fonction caractéristique (13.9) pour les variables aléatoires $s(\mathbf{R}_{\text{imp}})$ et $s(\mathbf{R}'_{\text{imp}})$, nous obtenons alors

$$\Gamma(\mathbf{R}, z\,;\,\mathbf{R}', z) = \exp[\mathrm{i}\mathbf{K}_i \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')] \exp\Big[-4k_{zi}^2 \left(\sigma^2 - C_s(\mathbf{R}'_{\text{imp}} - \mathbf{R}_{\text{imp}})\right)\Big]\,. \tag{14.40}$$

La figure 14.5 montre que la différence des positions d'impact vaut $\mathbf{R}'_{\text{imp}} - \mathbf{R}_{\text{imp}} = \mathbf{R}' - \mathbf{R}$ [voir aussi (14.39)]. La fonction de cohérence ne dépend alors que de la différence $\Delta\mathbf{R} \equiv \mathbf{R}' - \mathbf{R}$, comme à l'équation (14.34), et nous obtenons la distribution moyenne du flux réflechi (14.35) en prenant la transformée de FOURIER inverse de (14.40) par rapport à $\Delta\mathbf{R}$. Le résultat peut s'écrire

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f} \right\rangle &= \delta(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i) \exp\Big(-4k_{zi}^2\sigma^2\Big) + \\ &\quad + \frac{k_{zf}}{k_{zi}} \mathrm{e}^{-4k_{zi}^2\sigma^2} \int \frac{\mathrm{d}\Delta\mathbf{R}}{(2\pi)^2}\, H(\Delta\mathbf{R}) \exp[-\mathrm{i}(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i)\cdot\Delta\mathbf{R}],\end{aligned} \tag{14.41}$$

où nous avons séparé la distribution en une partie spéculaire (la première ligne) et une partie diffuse. Dans l'intégrale pour la partie diffuse apparaît la fonction $H(\Delta\mathbf{R})$ définie par

$$H(\Delta\mathbf{R}) = \exp\Big[4k_{zi}^2 C_s(\Delta\mathbf{R})\Big] - 1. \tag{14.42}$$

La distribution angulaire du champ réfléchi (14.41) contient un pic de réflexion spéculaire avec un poids $\exp(-4k_{zi}^2\sigma^2)$, ce qui est identique au coefficient moyen de réflexion en intensité que nous avons trouvé en (14.29). En outre, pour une rugosité faible, nous pouvons développer $H(\Delta\mathbf{R})$ dans (14.41) au premier ordre par rapport à la fonction de corrélation $C_s(\Delta\mathbf{R})$. Dans cette limite, l'intégrale se calcule et nous retrouvons la densité spectrale de la surface rugueuse :

$$\left\langle \left.\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f}\right|_{\text{diff}} \right\rangle \simeq 4k_{zf}k_{zi}\mathcal{P}_s(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i), \tag{14.43}$$

La partie diffuse de la distribution du champ réfléchi est alors identique au résultat (14.17) de l'approximation de RAYLEIGH.

Si par contre la rugosité σ est grande par rapport à la longueur d'onde $2\pi/k_{zi}$ du champ, le pic spéculaire dans (14.41) disparaît et il ne reste plus que la réflexion diffuse du champ (voir M. V. BERRY [83] pour un calcul approché explicite de la distribution du champ réfléchi dans cette limite).

Conclusion

Un miroir dont la surface est rugueuse donne lieu à une réflexion diffuse. Si la rugosité est faible devant la longueur d'onde du champ incident, la distribution angulaire du champ réflechi contient un pic de réflexion spéculaire et une partie diffuse. Après une moyenne statistique, la partie diffuse de la distribution réfléchie donne accès à la densité spectrale de la rugosité du miroir.

A l'aide de l'approximation de RAYLEIGH, nous avons montré que pour une rugosité faible, les quantités pertinentes pour la spécularité de la réflexion sont la «rugosité effective» du miroir [donnée par (14.20)] et la longueur d'onde du champ incident. Si la rugosité effective est faible devant la longueur d'onde, le pic de réflexion spéculaire domine la distribution du champ réfléchi et sa partie diffuse est faible.

Si le miroir rugueux fait partie d'un interféromètre, le contraste des franges d'interférence permet de mesurer la valeur moyenne du coefficient de réflexion en amplitude. A l'aide d'un modèle simple, l'on montre que le contraste des franges décroît exponentiellement avec la rugosité. Ceci peut également être interprété par les fluctuations de phase du champ réfléchi, de façon analogue à un facteur de DEBYE–WALLER. D'un point de vue plus général, les propriétés de cohérence du miroir rugueux sont caractérisées par la fonction de cohérence du champ réfléchi, qui est une fonction de corrélation du champ. Pour un miroir à rugosité faible, la fonction de cohérence contient une partie incohérente, proportionnelle à la fonction de corrélation de la surface, et une partie cohérente dont la longueur de cohérence est infinie. Nous avons étudié un exemple simple où le front d'onde du champ réfléchi est déformé par la rugosité du miroir. Cette description permet de calculer d'abord la fonction de cohérence de laquelle l'on déduit ensuite la distribution du champ réfléchi. Pour une rugosité faible, l'on retrouve ainsi les résultats de l'approximation de RAYLEIGH; si par contre la rugosité est grande devant la longueur d'onde du champ, le pic de réflexion spéculaire disparaît et la distribution devient complètement diffuse.

Perspectives

Pour l'instant, nous nous sommes restreint à un miroir parfait rugueux, donc à une barrière de potentiel infinie rugueuse. Cependant, cette approche ne semble pas très réaliste pour décrire la réflexion par le miroir à onde évanescente parce que les atomes interagissent avec un potentiel dont la profondeur $1/\kappa$ est généralement grande devant la longueur d'onde incidente. Dans le chapitre suivant, nous étudierons les interactions indirectes de l'atome avec la rugosité de la surface. A cet effet, nous allons tenir compte du fait que le faisceau lumineux qui crée l'onde évanescente par réflexion totale interne, est diffusé par la rugosité de surface. Pour décrire la diffusion du champ lumineux, l'on peut se servir d'une généralisation de l'approche de RAYLEIGH. Les résultats en sont résumés aux §§ III et B de l'annexe 15.B, où nous tenons également compte de la polarisation de la lumière.

Chapitre 15

Diffusion d'atomes par les potentiels rugueux en champ proche

Introduction

Nous étudions dans ce chapitre deux mécanismes qui créent une réflexion diffuse des atomes par le miroir à onde évanescente, à cause de la rugosité de la surface du diélectrique. L'atome peut seulement interagir de façon indirecte avec la surface parce qu'il en est repoussé par le potentiel dipolaire de l'onde évanescente. Dans les deux mécanismes que nous allons étudier, le champ électro-magnétique joue le rôle de «médiateur» entre la surface et l'atome. La rugosité de la surface du diélectrique implique qu'il existe un champ électro-magnétique diffusé ; l'interaction de ce champ diffusé avec l'atome fait apparaître un *potentiel rugueux* qui s'ajoute au potentiel lumineux de l'onde évanescente plane. L'atome est diffusé par le potentiel rugueux : il subit un transfert de vitesse aléatoire et c'est ainsi que la réflexion par le miroir devient diffuse.

Après une présentation qualitative de deux mécanismes d'interaction (paragraphe 15.1) nous allons illustrer notre démarche à l'aide d'un calcul simplifié du potentiel rugueux qui apparaît à cause de l'interaction de VAN DER WAALS (paragraphe 15.2). Cet exemple simple nous permettra d'introduire une *fonction de transfert* qui relie la rugosité de la surface du diélectrique au potentiel rugueux. Nous calculons ensuite la distribution angulaire des atomes réfléchis dans l'approximation de BORN. Il se trouve que cette distribution se factorise en un produit de la densité spectrale de la rugosité de surface, d'une part, et d'une *fonction de réponse atomique*, d'autre part. Nous étudions la portée de la fonction de réponse et estimons la probabilité totale de réflexion diffuse.

Au paragraphe 15.3, nous présentons une étude détaillée du potentiel rugueux créé par l'interférence entre la lumière diffusée par la surface diélectrique, d'une part, et l'onde évanescente, d'autre part. Cette étude a été l'objet de l'article «*Diffuse atomic reflection at a rough mirror*» que nous reproduisons à l'annexe 15.B.

Nous nous limitons dans ce chapitre à l'influence des potentiels rugueux au voisinage de la surface du diélectrique (dans le champ proche). L'effet de la lumière diffusée dans le champ lointain est etudié au chapitre 16.

15.1 Mécanismes d'interaction avec la surface rugueuse

15.1.1 L'interaction de VAN DER WAALS en présence de rugosité

Rappelons que l'origine de l'interaction de VAN DER WAALS pour l'état fondamental atomique est dans les fluctuations quantiques du moment dipolaire électrique de l'atome ; ces fluctuations font que l'atome crée un champ électro-magnétique qui est réfléchi par la surface diélectrique et interagit de nouveau avec le dipôle atomique [37, 38]. Lorsque la surface est rugueuse, le champ électro-magnétique réfléchi est modifié, et le potentiel de VAN DER WAALS acquiert une partie rugueuse. Une telle approche a été suivie par M. J. MEHL et W. L. SCHAICH [37] pour une surface métallique. Nous pouvons qualifier cette approche de «microscopique» car elle permet de déduire le potentiel rugueux de l'interaction de VAN DER WAALS à partir de premiers principes. Notons néanmoins que c'est un problème complexe : il faut déterminer la réflexion diffuse du champ électro-magnétique par la surface diélectrique pour toutes les fréquences du champ, et intégrer ensuite sur le spectre de fluctuations du dipôle atomique.

Nous allons suivre ici une approche «effective» plus simple, où nous représentons le diélectrique comme une distribution continue de dipôles avec lesquels le dipôle atomique interagit par l'interaction dipôle–dipôle habituelle

$$V_{\rm dd}(r) = -\frac{c_6}{r^6}, \tag{15.1}$$

où r est la distance entre les dipôles. Dans (15.1), nous avons supposé que les moments dipolaires ont des fluctuations isotropes, ce qui revient à négliger la partie quadrupolaire de l'interaction de VAN DER WAALS [92]. En intégrant le potentiel d'interaction $V_{\rm dd}(r)$ sur les dipôles du diélectrique, l'on trouve le potentiel de VAN DER WAALS en $1/z^3$ [144]. En tenant compte du profil de surface dans cette intégrale, nous pouvons obtenir la partie rugueuse du potentiel de VAN DER WAALS.[1]

15.1.2 Deux potentiels dipolaires dus à la lumière diffusée

Un deuxième mécanisme d'interaction avec la surface rugueuse fait intervenir l'interaction de l'atome avec la lumière évanescente au-dessus de la surface du diélectrique, ce qui représente l'essence même du miroir à atomes. Cependant,

[1] K. MØLMER, Université d'Århus (Danemark), communication privée (1995).

le champ lumineux au-dessus de la surface diffère d'une onde évanescente «parfaite» lorsque la surface présente de la rugosité. Les défauts de surface font diffuser le faisceau lumineux qui crée l'onde évanescente, de sorte que le champ lumineux total prend la forme

$$z > s(\mathbf{R}) : \quad E(\mathbf{r}) = E^{(0)}(\mathbf{r}) + E^{(1)}(\mathbf{r}), \tag{15.2}$$

où $E^{(0)}(\mathbf{r})$ correspond à l'onde évanescente pour une surface plane et $E^{(1)}(\mathbf{r})$ à la lumière diffusée. Comme nous l'avons vu au chapitre 14, le développement de FOURIER du champ diffusé $E^{(1)}(\mathbf{r})$ contient à la fois des ondes évanescentes et des ondes planes homogènes ; rappelons aussi que son amplitude est faible par rapport à l'onde évanescente $E^{(0)}(\mathbf{r})$ si la surface est peu rugueuse à l'échelle de la longueur d'onde optique. Ceci est généralement le cas pour les surfaces diélectriques utilisées dans les expériences du miroir à atomes, puisqu'il s'agit de surfaces de qualité optique.

Le potentiel dipolaire $V(\mathbf{r}) \propto |E(\mathbf{r})|^2$ contient donc trois termes avec des ordres de grandeur différents :

$$V(\mathbf{r}) = V^{(0)}(\mathbf{r}) + V^{(1)}(\mathbf{r}) + V^{(2)}(\mathbf{r}). \tag{15.3}$$

Le premier terme $V^{(0)}(\mathbf{r})$ correspond au potentiel dipolaire de l'onde évanescente que nous avons étudié dans la première partie de ce mémoire.

Le deuxième terme $V^{(1)}(\mathbf{r})$ représente le potentiel rugueux créé par l'interférence entre le champ diffusé et l'onde évanescente principale :

$$V^{(1)}(\mathbf{r}) \propto E^{(0)*}(\mathbf{r})\, E^{(1)}(\mathbf{r}) + E^{(1)*}(\mathbf{r})\, E^{(0)}(\mathbf{r}). \tag{15.4}$$

Nous allons l'appeler le *potentiel dipolaire rugueux*. Ce potentiel présente une modulation spatiale si l'onde évanescente et le champ diffusé contiennent des vecteurs d'onde différents. Un exemple est donné par l'onde évanescente stationnaire qui est formée par l'interférence entre deux ondes évanescentes. Dans le cas de la surface rugueuse, le champ lumineux diffusé contient un ensemble continu d'ondes diffusées, évanescentes et homogènes, qui interfèrent avec l'onde évanescente. Le potentiel dipolaire rugueux $V^{(1)}(\mathbf{r})$ possède alors une structure aléatoire et non périodique. Notons encore que le potentiel dipolaire rugueux est proportionnel à l'onde évanescente principale $E^{(0)}(\mathbf{r})$, il est donc localisé près de la surface. Il contient cependant des composantes de FOURIER avec une portée plus longue que le potentiel $V^{(0)}(\mathbf{r})$; ces composantes correspondent par exemple à l'interférence entre l'onde évanescente et une onde diffusée homogène $E^{(1)}(\mathbf{r}) \propto \exp \mathrm{i}\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}$ (k'_z réel) qui se propage dans le demi-espace au-dessus de la surface diélectrique.

Finalement, le potentiel $V^{(2)}(\mathbf{r})$ [le troisième terme dans (15.3)] correspond au potentiel dipolaire de la lumière diffusée :

$$V^{(2)}(\mathbf{r}) \propto |E^{(1)}(\mathbf{r})|^2. \tag{15.5}$$

Il présente également une structure aléatoire comme le potentiel rugueux du terme d'interférence (15.4), mais à la différence de ce dernier, il est non nul dans tout l'espace au-dessus de la surface diélectrique à cause des ondes planes homogènes du champ diffusé. Le potentiel $V^{(2)}(\mathbf{r})$ décrit l'interaction de l'atome avec les tavelures (*speckle*) du champ lointain de la lumière diffusé. Le temps d'interaction des atomes avec ce potentiel est beaucoup plus long que le temps caractéristique de la réflexion par le miroir. Nous sommes donc là devant un mécanisme physique assez différent pour un mouvement diffus des atomes. Nous allons étudier ce problème de façon qualitative au chapitre 16.

15.1.3 Le rôle du mouvement thermique de la surface

Finalement, l'on peut se poser la question de l'influence du mouvement thermique de la surface sur la rugosité du miroir à atomes. Pour l'instant, nous nous sommes en effet limité à un profil de surface statique. Cependant, les oscillations thermiques de la surface ont une fréquence caractéristique $\omega_D = k_B T_D/\hbar$ de l'ordre de $10^{12}\ 2\pi\text{Hz}$, où $T_D \sim 100$ K est appelé la «température de DEBYE» [73]. Elles sont donc beaucoup plus rapides que le temps d'interaction caractéristique $\tau_{\text{int}} \sim 10^{-7}$ s de l'atome si bien que l'atome n'est sensible qu'à un potentiel moyenné.[2] En fait, cet effet de moyenne est déjà pertinent pour la diffusion d'un jet d'atomes rapides par une surface cristalline; les interactions attractives de longue portée deviennent alors effectivement indépendantes du temps, comme l'a montré J. L. BEEBY en 1971 [73]. Son argument est d'autant plus valable dans notre situation parce que nous considérons des atomes plus lents qui sont réfléchis loin, à l'échelle des potentiels d'interaction avec la surface.

Si toutefois nous considérons des oscillations de la surface à plus basse fréquence, avec une période comparable au temps d'interaction, $\omega \sim 1/\tau_{\text{int}} \sim 10^6\ 2\pi\text{Hz}$, il s'agit en fait d'ondes de son (des «phonons») qui ont une amplitude u_z très faible dans la direction verticale. Dans une approche simplifiée (le «modèle de DEBYE»[3]), la densité d'états des phonons vaut $g_s(\omega) = 3\omega^2/\omega_D^3$ pour $\omega < \omega_D$. La valeur quadratique moyenne de l'amplitude des phonons dans la gamme de fréquences qui nous intéresse est alors donnée par [m_s est la masse d'un atome de la surface]

$$\langle u_z^2 \rangle = \frac{k_B T_s}{m_s} \int_0^{1/\tau_{\text{int}}} \mathrm{d}\omega\, \frac{g_s(\omega)}{\omega^2} = \frac{3 k_B T_s}{m_s \omega_D^3 \tau_{\text{int}}}, \tag{15.6}$$

où T_s est la température de la surface. Nous trouvons alors que l'amplitude des phonons dans cette gamme de fréquences est négligeable devant la longueur d'onde de DE BROGLIE des atomes incidents :

$$k_{zi} \langle u_z^2 \rangle^{1/2} = \sqrt{\frac{3 k_B T_s\, E_{zi}}{(k_B T_D)^2} \frac{1}{\omega_D \tau_{\text{int}}} \frac{M}{m_s}} \ll 1. \tag{15.7}$$

[2] Nous avons constaté un effet analogue au chapitre 12.

[3] La densité d'états et le spectre pour les amplitudes des phonons sont tirés des équations (4.34) et (4.46) de l'article de A. C. LEVI et H. SUHL [84].

En effet, même si l'on a $T_s > T_D$ à température ambiante, l'énergie incidente des atomes est très inférieure à la température de DEBYE $E_{zi} \ll k_B T_D$, et le temps d'interaction long devant la période de DEBYE $\omega_D \tau_{\text{int}} \gg 1$.

Remarque. Nous voudrions attirer l'attention sur une différence entre notre démarche sur l'interaction avec la surface rugueuse et celle de MEHL et SCHAICH [37]. Les potentiels rugueux que nous considérons sont en effet calculés au premier ordre par rapport au profil de surface $s(\mathbf{R})$, et par conséquent, ils s'annulent après la moyenne sur l'ensemble statistique pour la rugosité. MEHL et SCHAICH ont dû calculer la correction au potentiel de VAN DER WAALS jusqu'au deuxième ordre en $s(\mathbf{R})$, pour obtenir un résultat qui ne s'annule pas en moyenne. Cependant, pour une réalisation donnée du miroir à atomes, l'atome est diffusé par les potentiels rugueux du premier ordre, et leur distribution angulaire n'a aucune raison de s'annuler après la moyenne statistique. Dans notre approche statistique, un calcul des potentiels rugueux au premier ordre est donc suffisant pour décrire la réflexion diffuse des atomes, à condition de calculer la moyenne statistique pour les bonnes quantités physiques.

15.2 La contribution du potentiel de VAN DER WAALS rugueux

Nous étudions dans ce paragraphe le potentiel rugueux dû à l'interaction de VAN DER WAALS et sa contribution à la réflexion diffuse d'une onde atomique par le miroir à onde évanescente. Nous calculons d'abord la fonction de transfert du potentiel rugueux et ensuite la distribution en vecteurs d'onde des atomes réfléchis, dans l'approximation de BORN.

15.2.1 Calcul du potentiel rugueux

Considérons un atome à une position $\mathbf{r} = (\mathbf{R}, z)$ dans le vide au-dessus de la surface d'un diélectrique. Le milieu diélectrique remplit le demi-espace $z' < s(\mathbf{R}')$ situé au-dessous de la surface. Nous le représentons par une distribution continue de dipôles avec une densité en nombre ρ_d constante. L'énergie d'interaction de VAN DER WAALS $V_{\text{vdW}}(\mathbf{r})$ est alors la somme des potentiels d'interaction dipôle–dipôle (15.1) sur tout le milieu diélectrique[4] ($\mathbf{r}' = (\mathbf{R}', z')$) :

$$V_{\text{vdW}}(\mathbf{r}) = -\int \mathrm{d}\mathbf{R}' \int_{-\infty}^{s(\mathbf{R}')} \mathrm{d}z' \, \frac{\rho_d \, c_6}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^6}. \tag{15.8}$$

Si la surface du diélectrique est plane, $s(\mathbf{R}') \equiv 0$, l'évaluation de l'intégrale (15.8) donne le potentiel de VAN DER WAALS habituel (dans la limite électrostatique)

$$V_{\text{vdW}}^{(0)}(z) = -\frac{c_3}{z^3} \qquad \text{avec} \qquad c_3 = \frac{\pi \rho_d c_6}{6}. \tag{15.9}$$

[4] D. SARID, *Scanning force microscopy*, chap. 13.3, réf. [144].

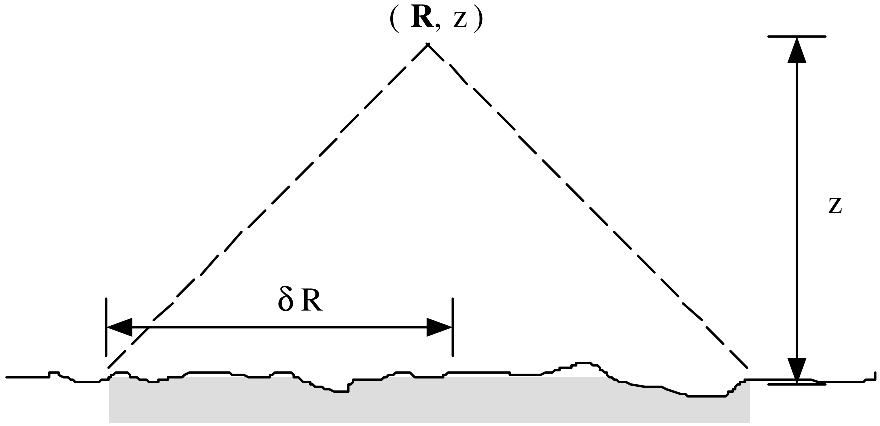

Figure 15.1: La partie rugueuse du potentiel de VAN DER WAALS *ne dépend que de la moyenne du profil de la surface rugueuse sur un cercle de rayon $\delta R \sim z$ situé au-dessous de l'atome.*

Cette relation permet d'exprimer le paramètre $\rho_d c_6$ en fonction du coefficient c_3 que l'on peut calculer par une théorie plus précise [37, 38].

Si la surface présente un profil rugueux, l'énergie d'interaction de VAN DER WAALS contient une correction $V^{(1)}_{\rm vdW}(\mathbf{r})$ par rapport au potentiel (15.9) qui est donnée par

$$\begin{aligned} V^{(1)}_{\rm vdW}(\mathbf{r}) &= -\int \mathrm{d}\mathbf{R}' \int\limits_0^{s(\mathbf{R}')} \mathrm{d}z' \, \frac{\rho_d \, c_6}{\left[(\mathbf{R}' - \mathbf{R})^2 + (z' - z)^2\right]^3} \\ &\approx -\int \mathrm{d}\mathbf{R}' \, \frac{\rho_d \, c_6 \, s(\mathbf{R}')}{\left[(\mathbf{R}' - \mathbf{R})^2 + z^2\right]^3}. \end{aligned} \tag{15.10}$$

En passant à la deuxième ligne, nous avons négligé la variation de l'intégrand avec z' à l'échelle du profil de surface $s(\mathbf{R})$. Cette approximation est justifiée si les variations de hauteur de la surface sont petites par rapport à la distance z de l'atome, ce qui est généralement le cas dans l'expérience parce que la distance minimale d'approche de l'atome est de l'ordre de la longueur d'onde optique $\lambda_L \gg \sigma$.

Le potentiel $V^{(1)}_{\rm vdW}(\mathbf{r})$ représente le *potentiel rugueux* dû à l'interaction de VAN DER WAALS. Nous constatons dans (15.10) qu'il correspond à une moyenne du profil de surface, pondérée avec la fonction $1/[(\mathbf{R}'-\mathbf{R})^2+z^2]^3$. Lorsque la distance z augmente, l'on peut alors s'attendre à ce que le potentiel de VAN DER WAALS rugueux ne soit pas sensible à des structures dans le profil de surface dont les dimensions transverses sont inférieures à $\delta R \sim z$ [voir l'illustration 15.1].

Mathématiquement, le potentiel rugueux (15.10) est une convolution du profil de surface $s(\mathbf{R})$. Par conséquent, il est commode d'introduire le développement de FOU-

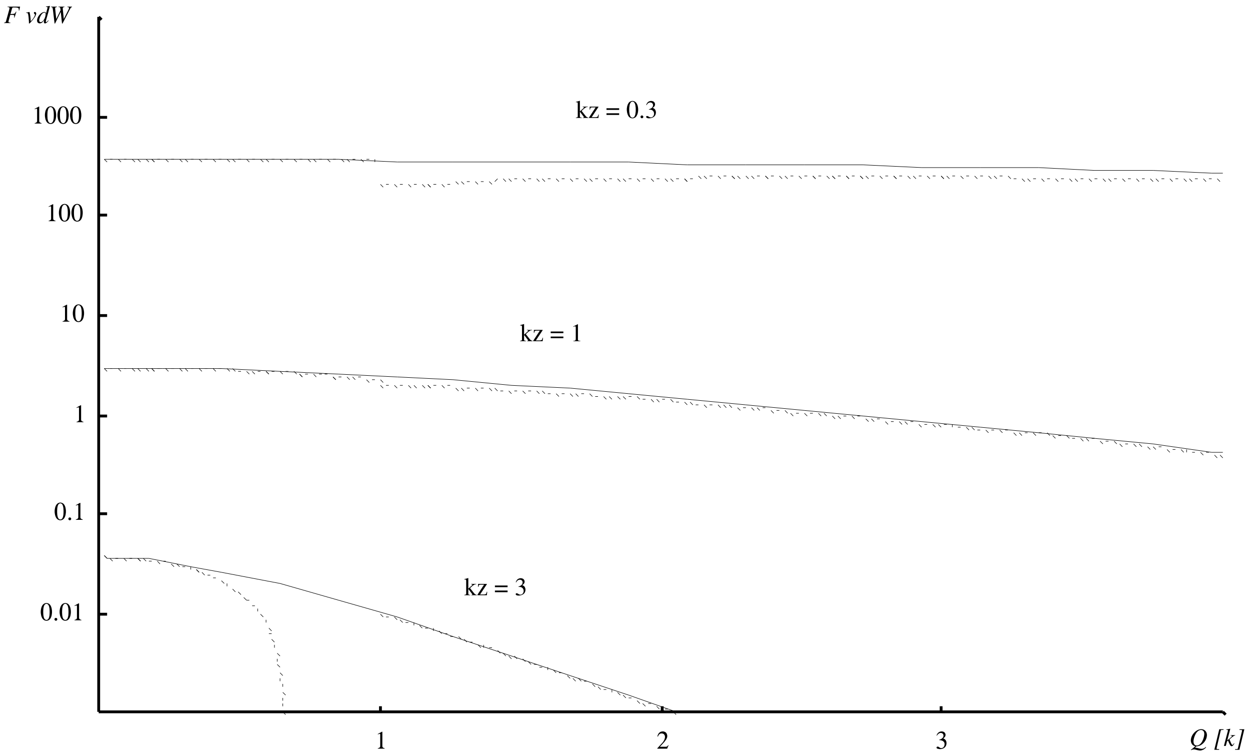

Figure 15.2: Module de la fonction de transfert $F_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z)$ du potentiel rugueux de VAN DER WAALS *(15.13), en fonction du vecteur d'onde Q, pour quelques valeurs de la distance z. La fonction de transfert est donnée en unités de $c_3 k^4$ et le vecteur d'onde Q en unités du vecteur d'onde optique k.*
En pointillées : les expressions asymptotiques (15.14a) et (15.14b).

RIER du potentiel rugueux $V^{(1)}_{\rm vdW}(\mathbf{r})$ par rapport à la coordonnée $\mathbf{R}$ dans le plan xOy :

$$V^{(1)}_{\rm vdW}(\mathbf{r}) = \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{Q}}{(2\pi)^2} \tilde{V}^{(1)}_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z)\, \exp \mathrm{i}\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}. \tag{15.11}$$

La transformée de FOURIER du potentiel rugueux est alors proportionnelle à la transformée de FOURIER de la surface :

$$\tilde{V}^{(1)}_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z) = S(\mathbf{Q})\, F_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z), \tag{15.12}$$

où $F_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z)$ est la *fonction de transfert* (qui a la dimension physique d'une force). Elle introduit un filtrage des fréquences spatiales de la surface rugueuse en amplifiant certaines plages de fréquences et en en supprimant d'autres. En général, ce filtrage dépendra de la distance z de la surface moyenne, et d'après ce que nous venons de dire ci-dessus, nous nous attendons à une fréquence de coupure de l'ordre de $\delta Q \sim 1/z$.

Pour le potentiel de VAN DER WAALS rugueux, la fonction de transfert est donnée par[5] :

$$F_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z) = -\int \mathrm{d}\mathbf{R} \frac{\rho_d c_6\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{Q}\,\mathbf{R}}}{(\mathbf{R}^2 + z^2)^3} = -\frac{3c_3}{2}\frac{Q^2}{z^2}\, K_2(Qz)\,, \tag{15.13}$$

où $K_2(\cdot)$ est une fonction de BESSEL de la deuxième espèce, et $Q = |\mathbf{Q}|$. Nous constatons que la fonction de transfert est isotrope parce qu'elle ne dépend que du module de $\mathbf{Q}$. Notons les comportements asymptotiques suivants[6] :

$$\begin{aligned} Qz \to 0 \; : \quad F_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z) &= -\frac{3c_3}{z^4}\left[1 - \frac{Q^2 z^2}{4} + \mathcal{O}[(Qz)^4]\right], & (15.14\mathrm{a}) \\ Qz \to \infty \; : \quad F_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z) &= -\frac{3\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}}\, c_3 Q^4 \frac{\mathrm{e}^{-Qz}}{(Qz)^{5/2}} \times \\ &\quad \times \left[1 + \frac{15}{8\,Qz} + \mathcal{O}\!\left(\frac{1}{(Qz)^2}\right)\right]. & (15.14\mathrm{b}) \end{aligned}$$

Sur la figure 15.2, nous représentons le module de la fonction de transfert (15.13) en fonction du vecteur d'onde Q, pour quelques distances z. Nous constatons que le filtrage par la fonction de transfert supprime effectivement les fréquences spectrales de la rugosité de surface avec $Q \gtrsim 1/z$, comme le montre aussi le comportement asymptotique (15.14b). Pour les structures à grand échelle (les petits vecteurs d'onde), le développement (15.14a) de la fonction de transfert montre que

$$Q \ll \frac{1}{z} \; : \quad \tilde{V}^{(1)}_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z) \approx S(\mathbf{Q}) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\frac{c_3}{z^3}, \tag{15.15}$$

le potentiel rugueux correspond donc au changement au premier ordre de l'interaction de VAN DER WAALS à cause de la variation de la distance de la surface diélectrique. Par conséquent, le potentiel rugueux est de l'ordre de

$$V^{(1)}_{\rm vdW}(\mathbf{r}) \sim \frac{\sigma}{z} V^{(0)}_{\rm vdW}(z), \tag{15.16}$$

et généralement, il est beaucoup plus petit que le potentiel de VAN DER WAALS plan.

15.2.2 La fonction de réponse atomique

Nous allons considérer le potentiel de VAN DER WAALS rugueux comme une perturbation, en utilisant l'approximation de BORN. Le miroir à atomes rugueux est donc caractérisé par le potentiel

$$V(\mathbf{r}) = V^{(0)}(z) + V^{(1)}_{\rm vdW}(\mathbf{r}), \tag{15.17}$$

où le potentiel $V^{(0)}(z)$ est plan, indépendant du profil $s(\mathbf{R})$ de la surface rugueuse et répulsif de façon à assurer la réflexion des atomes par le miroir. Nous l'identifions

[5] L'intégrale (15.13) est calculée à l'aide la formule 11.4.44 de ABRAMOWITZ et STEGUN, *op. cit.*

[6] ABRAMOWITZ et STEGUN, *op. cit.*, formules 9.6.9 et 9.7.2.

généralement avec le potentiel dipolaire $V_{\max}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}$ de l'onde évanescente plane, mais l'on peut y incorporer le potentiel de VAN DER WAALS plan (15.9).[7] En absence de rugosité, un atome avec un vecteur d'onde atomique incident $\mathbf{k}_i = (\mathbf{K}_i, -k_{zi})$ est réfléchi spéculairement par le potentiel plan, et sa fonction d'onde est le produit d'une onde plane $\exp \mathrm{i}\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{R}$ dans le plan xOy et d'une fonction propre en une dimension $\phi_{k_{zi}}(z)$ pour le potentiel $V^{(0)}(z)$. Nous normalisons les fonctions d'onde comme à l'équation (3.7) du chapitre 3.

Dans l'approximation de BORN, nous calculons une correction à la fonction d'onde spéculaire, $\psi^{(1)}(\mathbf{r})$, au premier ordre en $V^{(1)}_{\mathrm{vdW}}(\mathbf{r})$. En nous plaçant dans la région asymptotique $z \to +\infty$, $\psi^{(1)}(\mathbf{r})$ est donné par le développement de FOURIER (14.2), où les amplitudes de FOURIER $\tilde{\psi}^{(1)}(\mathbf{K}_f)$ valent [voir (7.33) et les équations (3.7, 3.10b) de N. CABRERA *et al.* [58]] :

$$\tilde{\psi}^{(1)}(\mathbf{K}_f) = \frac{4\mathrm{i}M}{\hbar^2 k_{zf}} \langle \phi_{k_{zf}}(z) | \tilde{V}^{(1)}_{\mathrm{vdW}}(\mathbf{Q}, z)\, | \phi_{k_{zi}}(z) \rangle \; \exp \tfrac{\mathrm{i}}{2} [\Delta\varphi(k_{zi}) + \Delta\varphi(k_{zf})] \,. \tag{15.18}$$

Dans cette expression, $\Delta\varphi(k_{z,if})$ est le déphasage pour la réflexion sur le potentiel moyen, $\mathbf{Q}$ est le *transfert de vecteur d'onde atomique* donné par

$$\mathbf{Q} = \mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i, \tag{15.19}$$

et la composante normale k_{zf} du vecteur d'onde final $\mathbf{k}_f = (\mathbf{K}_f, k_{zf})$ est fixée par la conservation d'énergie

$$\mathbf{K}_f^2 + k_{zf}^2 = \mathbf{K}_i^2 + k_{zi}^2. \tag{15.20}$$

Nous constatons que les amplitudes de FOURIER (15.18) de l'onde atomique diffusée sont proportionnelles aux éléments de matrice de la transformée de FOURIER $\tilde{V}^{(1)}_{\mathrm{vdW}}(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i, z)$ du potentiel rugueux. Dans les directions parallèles au plan du miroir, nous retrouvons ici un résultat bien connu de la théorie de la diffusion dans l'approximation de BORN, à savoir que la probabilité de diffusion est donnée par la transformée de FOURIER du potentiel diffuseur, calculée pour le transfert de vecteur d'onde $\mathbf{Q}$. Le mouvement de l'atome perpendiculaire au plan est contenu dans l'élément de matrice dans (15.18).

Rappelons que les coefficients de FOURIER $\tilde{\psi}^{(1)}(\mathbf{K}_f)$ (15.18) déterminent la distribution angulaire $\mathrm{d}w/\mathrm{d}\mathbf{K}_f$ des atomes réfléchis (14.11). En prenant la moyenne par rapport à l'ensemble statistique pour la surface rugueuse, nous trouvons finalement que la probabilité différentielle moyenne de réflexion est de la forme

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\mathbf{K}_f} \right\rangle = \delta(\mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i) + (2\pi)^{-2} \left| B_{\mathrm{at}}(\mathbf{Q}) \right|^2 \, \mathcal{P}_s(\mathbf{Q}). \tag{15.21}$$

Dans ce résultat, la fonction δ correspond à la réflexion spéculaire de la fonction d'onde non perturbée, et le deuxième terme aux atomes qui ont été diffusés par le potentiel

[7]Notons que dans ce cas, l'on dispose pas de solutions analytiques pour les fonctions d'onde non perturbées.

rugueux. Nous constatons que la probabilité différentielle de réflexion diffuse est proportionnelle à la densité spectrale $\mathcal{P}_s(\mathbf{Q})$ de la rugosité de surface. La densité spectrale est pondérée par le carré de la *fonction de réponse atomique* $B_{\text{at}}(\mathbf{Q})$, avec

$$B_{\text{at}}(\mathbf{Q}) = \frac{4M}{\hbar^2 \sqrt{k_{zf} k_{zi}}} \langle \phi_{k_{zf}}(z) | F_{\text{vdW}}(\mathbf{Q}, z) \, | \phi_{k_{zi}}(z) \rangle \, . \tag{15.22}$$

La fonction de réponse est donc donnée par l'élément de matrice de la fonction de transfert $F_{\text{vdW}}(\mathbf{Q}, z)$.[8]

L'interprétation physique de l'équation (15.21) est immédiate : la fonction de réponse caractérise la probabilité de réflexion diffuse pour une fréquence spatiale $\mathbf{Q}$ donnée dans le spectre de FOURIER de la rugosité de surface. Par exemple, si la densité spectrale contient seulement les fréquences spatiales[9] $\mathbf{Q} = \pm\mathbf{G}$, le potentiel rugueux réalise un réseau de diffraction avec une période $2\pi/|\mathbf{G}|$; les carrés $|B_{\text{at}}(\pm\mathbf{G})|^2$ de la fonction de réponse donnent alors les populations $w_{\pm 1}$ de la figure de diffraction. L'équation (15.22) montre en outre que l'efficacité de la réflexion diffuse est déterminée par le couplage (l'élément de matrice) entre les ondes atomiques incidente et diffusée qu'induit une composante de FOURIER donnée du potentiel rugueux. Ce couplage dépend de la portée l_z de la fonction de transfert $F_{\text{vdW}}(\mathbf{Q}, z)$ en fonction de la distance z, dont nous donnerons une estimation au paragraphe suivant. Comme pour la diffraction par l'onde évanescente stationnaire, nous nous attendons à ce que l'élément de matrice limite le transfert de vecteur d'onde Δk_z dans la direction normale au miroir à environ $1/l_z$.

Finalement, la fonction de réponse atomique intervient dans la probabilité totale w_{diff} de réflexion diffuse (14.18). Exprimons-la comme à l'équation (14.19) par une rugosité effective : $w_{\text{diff}} = (2k_{zi}\sigma_{\text{eff}})^2$. Nous obtenons alors

$$\sigma_{\text{eff}}^2 = \frac{1}{(2k_{zi})^2} \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{Q}}{(2\pi)^2} \, |B_{\text{at}}(\mathbf{Q})|^2 \; \mathcal{P}_s(\mathbf{Q}). \tag{15.23}$$

Il s'ensuit que d'une part, la variation de la fonction de transfert $B_{\text{at}}(\mathbf{Q})$ avec la fréquence spatiale $\mathbf{Q}$ filtre une certaine plage de fréquences spectrales qui contribuent à la rugosité effective du miroir. D'autre part, la quantité sans dimension $B_{\text{at}}(\mathbf{Q})/2k_{zi}$ détermine le rapport entre la rugosité effective du miroir et la « rugosité non filtrée » de la surface rugueuse [l'intégrale de la densité spectrale $\mathcal{P}_s(\mathbf{Q})$ sur toutes les fréquences spatiales, voir (13.24)].

[8]Notons que pour le miroir parfait rugueux, la fonction de réponse vaut $B_{\text{at}}(\mathbf{Q}) = \sqrt{4k_{zf}k_{zi}}$ [voir (14.17)].

[9]A cause de la relation $S(-\mathbf{Q}) = S^*(\mathbf{Q})$ (13.17), la densité spectrale est une fonction paire de $\mathbf{Q}$. Les fréquences spatiales apparaissent donc toujours en paires $\{\mathbf{Q}, -\mathbf{Q}\}$.

15.2.3 Estimation pour la fonction de réponse

Pour la fonction de réponse (15.22) du potentiel de VAN DER WAALS rugueux, nous devons évaluer l'élément de matrice de la fonction de transfert $F_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z_{\rm reb})$ (15.13)

$$\langle \phi_{k_{zf}}(z)| F_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z) \, |\phi_{k_{zi}}(z)\rangle = -\tfrac{3}{2} \, c_3 Q^2 \, \langle \phi_{k_{zf}}(z)| \frac{K_2(Qz)}{z^2} \, |\phi_{k_{zi}}(z)\rangle \, . \qquad (15.24)$$

Nous notons que la fonction de réponse $B_{\rm at}(\mathbf{Q})$ est isotrope en fonction de $\mathbf{Q}$, elle aussi. A notre connaissance, il n'existe pas de solution analytique à l'intégrale (15.24). Pour simplifier le problème, nous nous plaçons en incidence normale où la différence entre les vecteurs d'onde $k_{z,if}$ est faible. A l'annexe 15.A, nous démontrons alors les estimations suivantes pour l'élément de matrice :

$$\left|\langle \phi_{k_{zf}}(z)| F_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z) \, |\phi_{k_{zi}}(z)\rangle\right| \lesssim \begin{cases} \dfrac{z_{\rm reb}}{3} F_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z_{\rm reb}), & \text{pour} \quad Q z_{\rm reb} \ll 1, \\ \dfrac{1}{Q} F_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z_{\rm reb}), & \text{pour} \quad Q z_{\rm reb} \gg 1. \end{cases} \qquad (15.25)$$

Nous constatons que, comme la fonction de transfert $F_{\rm vdW}(\mathbf{Q}, z_{\rm reb})$, la fonction de réponse a une largeur de l'ordre de $\delta Q \sim 1/z_{\rm reb}$ [voir le comportement asymptotique (15.14b)]. Pour une densité spectrale de rugosité constante dans cette gamme de fréquences spatiales, les atomes diffusés par le potentiel de VAN DER WAALS rugueux auront donc une distribution de vitesse transverse avec une largeur de l'ordre de $\hbar/M z_{\rm reb}$. Cette largeur est de l'ordre de la vitesse de recul pour un point de rebroussement $z_{\rm reb} \simeq \lambda_L/2\pi$; par ailleurs, elle diminue si $z_{\rm reb}$ s'éloigne de la surface.

L'estimation (15.25) implique en outre que la fonction de réponse $B_{\rm at}(\mathbf{Q})$ (15.22) atteint sa valeur maximale dans la limite $\mathbf{Q} \to \mathbf{0}$, où elle est de l'ordre de

$$\max |B_{\rm at}(\mathbf{Q})| \simeq 2 k_{zi} \frac{|V^{(0)}_{\rm vdW}(z_{\rm reb})|}{E_{zi}}. \qquad (15.26)$$

[Nous avons utilisé le développement asymptotique (15.14a) pour la fonction de transfert et supposé que $k_{zf} \simeq k_{zi}$.] Ici, $V^{(0)}_{\rm vdW}(z_{\rm reb}) = -c_3/z^3_{\rm reb}$ est le potentiel de VAN DER WAALS plan au point de rebroussement. Par conséquent, la rugosité effective (15.23) du miroir à atomes due au potentiel de VAN DER WAALS rugueux est de l'ordre de

$$\sigma^{(\rm vdW)}_{\rm eff} \sim \frac{|V^{(0)}_{\rm vdW}(z_{\rm reb})|}{E_{zi}} \overline{\sigma}_{1/z_{\rm reb}}, \qquad (15.27)$$

où $\overline{\sigma}_{1/z_{\rm reb}}$ correspond à la rugosité de surface dans la gamme de fréquences spatiales $|\mathbf{Q}| = 0 \ldots 1/z_{\rm reb}$ (voir la fonction de filtrage représentée sur la figure 15.2).

La rugosité effective $\sigma^{(\rm vdW)}_{\rm eff}$ est donc plus petite que la «vraie» rugosité de surface σ si l'atome rebrousse chemin à une distance $z_{\rm reb}$ où le potentiel de VAN DER WAALS est négligeable devant l'énergie incidente. Ceci est généralement le cas pour une énergie incidente bien en-dessous du maximum de la barrière de potentiel créée par le potentiel lumineux répulsif et le potentiel de VAN DER WAALS attractif. Pour une énergie incidente au voisinage du sommet de la barrière par contre, σ_{eff} est du même ordre que σ.

Remarque. La rugosité effective varie comme le potentiel de VAN DER WAALS, en $1/z_{\text{reb}}^3$, alors que le potentiel rugueux, lui, est proportionnel à $1/z_{\text{reb}}^4$, comme la dérivée du potentiel de VAN DER WAALS [voir (15.16)]. Pour interpréter ceci, rappelons que la probabilité de réflexion diffuse est déterminée par l'effet cumulé du potentiel rugueux pendant le processus de réflexion, comme l'exprime l'intégrale sur z dans l'élément de matrice ; et puisque le potentiel rugueux varie comme une loi de puissance, il est de longue portée ce qui rajoute un facteur z_{reb} à l'intégration dans (15.25).

Notons cependant que les estimations (15.25) surestiment la valeur de la fonction de réponse. En effet, l'approximation électrostatique pour le potentiel de VAN DER WAALS n'est plus vérifiée pour les contributions à l'élément de matrice qui proviennent de distances très grandes. Le vrai potentiel pour l'interaction de VAN DER WAALS présente alors des oscillations [38] qui réduisent la valeur de l'élément de matrice.

15.3 La contribution du champ évanescent rugueux à la réflexion diffuse

Présentation

Nous reproduisons à l'annexe 15.B l'article « *Diffuse atomic reflection at a rough mirror* » par C. H., K. MØLMER, R. KAISER, N. VANSTEENKISTE, C. I. WESTBROOK et A. ASPECT, qui a été accepté pour publication à la *Physical Review A* le 17 octobre 1996. Dans ce travail, nous étudions l'influence de la lumière diffusée par la surface diélectrique rugueuse sur la réflexion d'atomes par le miroir à onde évanescente. Plus précisément, nous nous limitons au potentiel dipolaire rugueux $V^{(1)}(\mathbf{r})$ créé par l'interférence entre l'onde évanescente principale et la lumière diffusée. Nous résumons ici les résultats que nous avons obtenus.[10]

La théorie se sépare en deux étapes : dans un premier temps (§ III de l'annexe 15.B), nous calculons le champ lumineux, dans l'approximation scalaire, jusqu'au premier ordre par rapport au profil de surface, et nous identifions le potentiel rugueux avec le terme d'interférence dans le potentiel dipolaire du champ lumineux (§ IV).

Nous calculons ensuite la diffusion de l'onde atomique par ce potentiel. Nous nous servons à cet effet de deux approches différentes. Au § V, l'approximation de BORN nous permet de déterminer la fonction de réponse atomique. Cette approche est valable dans le régime quasi-spéculaire où la probabilité totale de réflexion diffuse est faible devant l'unité. Pour couvrir aussi la limite opposée d'une réflexion complètement diffuse, nous présentons un deuxième calcul basé sur l'approximation du réseau de phase

[10] Nous ferons référence aux équations de l'annexe 15.B en utilisant le signet « **DifR** ».

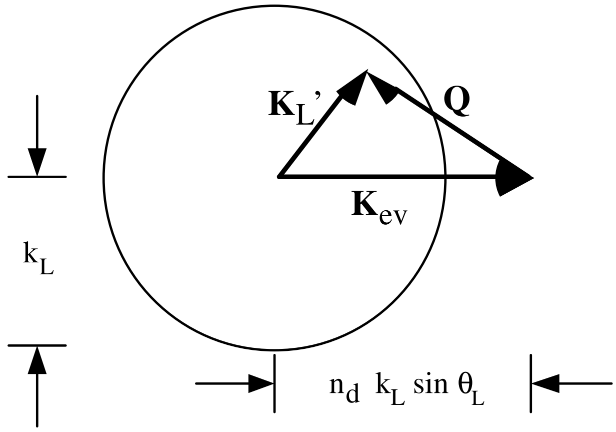

Figure 15.3: Diffusion de la lumière par une surface rugueuse. $\mathbf{K}_{\text{év}}, \mathbf{K}'_L$ *: composantes parallèles au plan* xOy *de l'onde évanescente principale et d'une onde lumineuse diffusée ;* $\mathbf{Q}$ *: vecteur d'onde du spectre de rugosité de la surface. L'intérieur du cercle correspond aux ondes homogènes diffusées pour lesquelles* $|\mathbf{K}'_L| < k_L$*.*

mince (§ VI) : nous déterminons le déphasage de l'onde atomique réfléchie par l'onde évanescente rugueuse et calculons ensuite sa fonction de cohérence. Comme nous l'avons vu au paragraphe 14.2.2, la fonction de cohérence permet d'obtenir la probabilité différentielle de réflexion par une transformée de FOURIER. Au dernier § VII, nous généralisons notre approche à un champ lumineux polarisé et un atome avec plusieurs sous-niveaux magnétiques dans l'état fondamental.

15.3.1 Le champ lumineux diffusé

Comme au chapitre 14, nous calculons le champ lumineux diffusé jusqu'au premier ordre par rapport au profil de surface, en utilisant l'approximation de RAYLEIGH. La seule différence par rapport à un miroir parfait rugueux tient aux conditions aux limites puisque l'onde lumineuse est diffusée par l'interface entre un milieu diélectrique et le vide.

Le champ lumineux est donc la somme de deux termes [voir (15.2)] : une onde évanescente principale $E^{(0)}(\mathbf{r})$ qui est présente même en absence de rugosité, et un champ diffusé $E^{(1)}(\mathbf{r})$. La composante de FOURIER $E^{(1)}(\mathbf{K}'_L)$ du champ diffusé est proportionnelle à la transformée de FOURIER $S(\mathbf{Q})$ de la surface, pour le transfert de vecteur d'onde optique $\mathbf{Q} = \mathbf{K}'_L - \mathbf{K}_{\text{év}}$, où $\mathbf{K}_{\text{év}}$ est le vecteur d'onde parallèle au plan xOy de l'onde évanescente principale. Suivant son vecteur d'onde $\mathbf{K}'_L$, le champ lumineux diffusé correspond également à une *onde évanescente* (pour $|\mathbf{K}'_L| > k_L$), ou bien à une *onde plane homogène* ($|\mathbf{K}'_L| < k_L$) qui se propage dans le demi-espace au-dessus de la surface (voir la figure 15.3).

15.3.2 Le potentiel dipolaire rugueux

Dans l'espace de FOURIER, le potentiel dipolaire rugueux $V^{(1)}(\mathbf{r})$ (15.4) est caractérisé par la fonction de transfert [l'équation (**DifR** 4.4)]

$$\begin{aligned} F^{(1)}(\mathbf{Q}, z) &= \frac{1}{S(\mathbf{Q})} \frac{d^2}{\hbar\Delta} \Big\{ E^{(0)*} E^{(1)}(\mathbf{K}_{\text{év}} + \mathbf{Q}) \exp[-(\kappa + \kappa'_+)z] + \\ &\qquad + E^{(1)*}(\mathbf{K}_{\text{év}} - \mathbf{Q}) E^{(0)} \exp[-(\kappa + \kappa'^*_-)z] \Big\} \\ &= V_{\max}\kappa \Big\{ f(\mathbf{K}_{\text{év}} + \mathbf{Q}) \exp[-(\kappa + \kappa'_+)z] + \\ &\qquad + f^*(\mathbf{K}_{\text{év}} - \mathbf{Q}) \exp[-(\kappa + \kappa'^*_-)z] \Big\}, \end{aligned} \tag{15.28}$$

où $V_{\max}$ est la valeur du potentiel dipolaire de l'onde évanescente principale à la surface du diélectrique, et la quantité sans dimension $f(\mathbf{K}'_L)$ correspond à une « fonction de réponse optique » : elle détermine l'amplitude de FOURIER $E^{(1)}(\mathbf{K}'_L)$ du champ lumineux diffusé [voir (**DifR** 3.3)]. Dans la direction normale, les ondes diffusées $E^{(1)}(\mathbf{K}_{\text{év}} \pm \mathbf{Q})$ ont des constantes de décroissance $\kappa'_\pm$. Les $\kappa'_\pm$ sont imaginaires avec une partie imaginaire *négative*, s'il s'agit d'une onde plane homogène qui se propage dans la direction des z croissants.

La fonction de transfert (15.28) est la somme de deux termes que l'on peut interpréter par deux transitions RAMAN (voir la figure 15.4) : le premier terme correspond à un processus où l'atome absorbe un photon de l'onde lumineuse diffusée $E^{(1)}(\mathbf{K}_{\text{év}} + \mathbf{Q})$ et en émet un autre dans l'onde évanescente principale $E^{(0)}(\mathbf{r})$ [la figure 15.4(a)] ; le deuxième terme dans (15.28) caractérise l'absorption d'un photon de l'onde évanescente principale et l'émission stimulée dans l'onde diffusée $E^{(1)}(\mathbf{K}_{\text{év}} - \mathbf{Q})$ [la figure 15.4(a)]. Dans les deux processus, le changement du vecteur d'onde atomique parallèle au plan vaut $+\mathbf{Q}$.

Rappelons finalement que le potentiel dipolaire est proportionnel à l'intensité lumineuse du champ proche. Le calcul que nous en avons présenté ici est donc bien connu dans le contexte de la microscopie optique en champ proche, où l'on introduit une sonde dans le champ lumineux au voisinage d'une surface [62, 63, 64, 65]. La relation entre le potentiel rugueux $V^{(1)}(\mathbf{r})$ et le profil $s(\mathbf{R})$ permet alors de reconstruire la topographie de la surface à partir d'une mesure de l'intensité lumineuse du champ proche. La fonction de transfert $F^{(1)}(\mathbf{Q}, z)$ a également été introduite dans ce contexte pour caractériser la réponse spectrale de l'appareil de mesure au profil de la surface [152].

15.3.3 La fonction de réponse atomique

En ce qui concerne les atomes, leur fonction de réponse $B_{\text{at}}(\mathbf{Q})$ est déterminée par l'élément de matrice de la fonction de transfert (15.28) du potentiel rugueux entre les fonctions d'onde $\phi_{k_{z,if}}(z)$ pour la réflexion spéculaire. Nous supposons que le potentiel plan $V^{(0)}(z)$ est donné par le potentiel dipolaire de l'onde évanescente

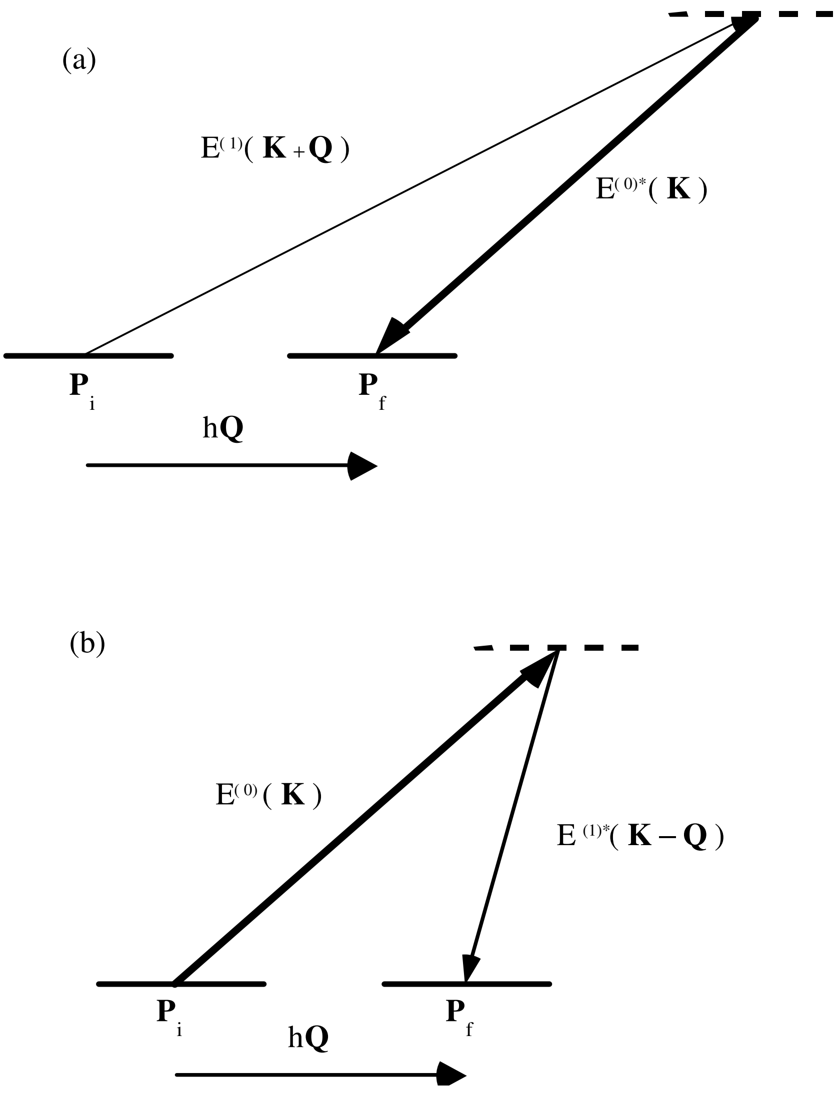

Figure 15.4: Interprétation de la réflexion diffuse d'une onde atomique par des processus RAMAN *stimulés.*

principale, et nous négligeons l'interaction de VAN DER WAALS. Dans cette approximation, l'élément de matrice se calcule de façon analytique, et nous trouvons [l'équation (**DifR** 5.15)]

$$\begin{aligned} B_{\text{at}}(\mathbf{Q}) \;=\; & k_{zi} \Big\{ f(\mathbf{K}_{\text{év}} + \mathbf{Q}) \exp\Big[\Big(\kappa - \kappa'_+ \Big) z_{\text{reb}} \Big] \beta_+ + \\ & + f^*(\mathbf{K}_{\text{év}} - \mathbf{Q}) \exp\Big[\Big(\kappa - \kappa'^*_- \Big) z_{\text{reb}} \Big] \beta^*_- \Big\} \end{aligned} \qquad (15.29)$$

où k_{zi} est la composante normale du vecteur d'onde atomique incident et z_{reb} le point de rebroussement classique pour la vitesse incidente $v_{zi} = \hbar k_{zi}/M$. L'expression (15.29) est valable dans la limite semi-classique $k_{zi} \gg \kappa$.

A part les facteurs $\beta_\pm$ sur lesquels nous reviendrons dans un instant, la fonction de réponse (15.29) est proportionnelle au «contraste» du potentiel dipolaire rugueux au point de rebroussement de l'atome incident:

$$B_{\text{at}}(\mathbf{Q}) \sim \frac{k_{zi}}{\kappa} \frac{F^{(1)}(\mathbf{Q}, z_{\text{reb}})}{V^{(0)}(z_{\text{reb}})}, \qquad (15.30)$$

et nous constatons l'analogie avec la diffraction par une onde évanescente stationnaire : l'amplitude du premier ordre vaut en effet $|a_1| \simeq \epsilon k_{zi} \beta / 2\kappa$. Dans la diffraction, le contraste est cependant constant à travers l'onde stationnaire, alors que pour le potentiel rugueux, il varie avec z_{reb} parce que le champ lumineux diffusé contient des ondes évanescentes (et homogènes) avec des constantes de décroissance (de propagation) $\kappa'_\pm$ différentes.

Les facteurs $\beta_\pm \equiv \beta\Big(\Delta k_z/\kappa, \kappa'_\pm/\kappa\Big)$ dans la fonction de réponse (15.29) généralisent le facteur d'obliquité $\beta(\Delta k_z/\kappa)$ que nous avons rencontré dans l'approximation de BORN pour la diffraction [à l'équation (7.40)]. Ils tiennent compte du fait que le potentiel diffuseur a une constante de décroissance $\kappa + \kappa'_\pm$ différente de celle 2κ du potentiel dipolaire de l'onde évanescente principale. Nous appelerons β le «facteur de recouvrement» (*overlap factor*) dans l'annexe 15.B, et son expression explicite est donnée à l'équation (**DifR** 5.12). Nous trouvons encore que le facteur de recouvrement limite les transferts de vecteur d'onde Δk_z à la constante de décroissance κ de l'onde évanescente, comme pour la diffraction d'atomes. Dans le régime semi-classique, la composante normale du vecteur d'onde atomique est donc quasiment conservée lors de la réflexion diffuse.

Les fréquences spatiales pertinentes

Au § V.3.1 de l'annexe 15.B, nous montrons que la portée de la fonction de réponse atomique $B_{\text{at}}(\mathbf{Q})$ (15.29) en fonction de $\mathbf{Q}$ est déterminée par la fonction de transfert $F(\mathbf{Q}, z_{\text{reb}})$ du potentiel rugueux à la distance z_{reb} du point de rebroussement et par les facteurs de recouvrement $\beta_\pm$.

Le résultat est le suivant : si le point de rebroussement se trouve loin de la surface, $\kappa z_{\text{reb}} \gtrsim 1$, la fonction de réponse est concentrée autour de deux cercles définis par

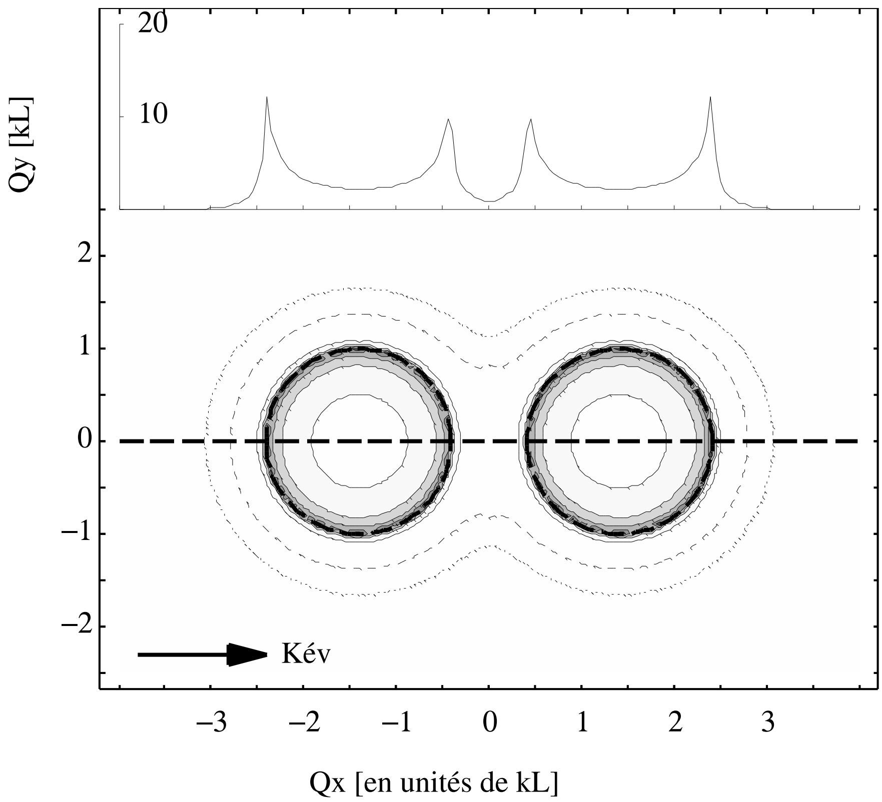

Figure 15.5: Lignes de niveaux de la fonction de réponse atomique $|B_{at}(\mathbf{Q})\,|^2$ (15.29) pour un point de rebroussement loin de la surface, en incidence normale. Le transfert de vecteur d'onde atomique $\mathbf{Q}$ est donné en unités du vecteur d'onde optique k_L. Les régions grisées correspondent à des grandes valeurs de la fonction de réponse. L'insert montre une coupe le long de la ligne épaisse en tirets, parallèle à la direction de propagation de l'onde évanescente principale (l'axe Ox).
Le point de rebroussement se trouve à la distance $z_{\text{reb}} = 2\kappa^{-1}\log 2$, et les atomes sont incidents en incidence normale avec un vecteur d'onde $k_{zi} = 50\,\kappa$. Le vecteur d'onde de l'onde évanescente principale vaut $\mathbf{K}_{\text{év}} = \sqrt{2}\,k_L\,\mathbf{e}_x$ et nous avons choisi $\kappa = k_L$.

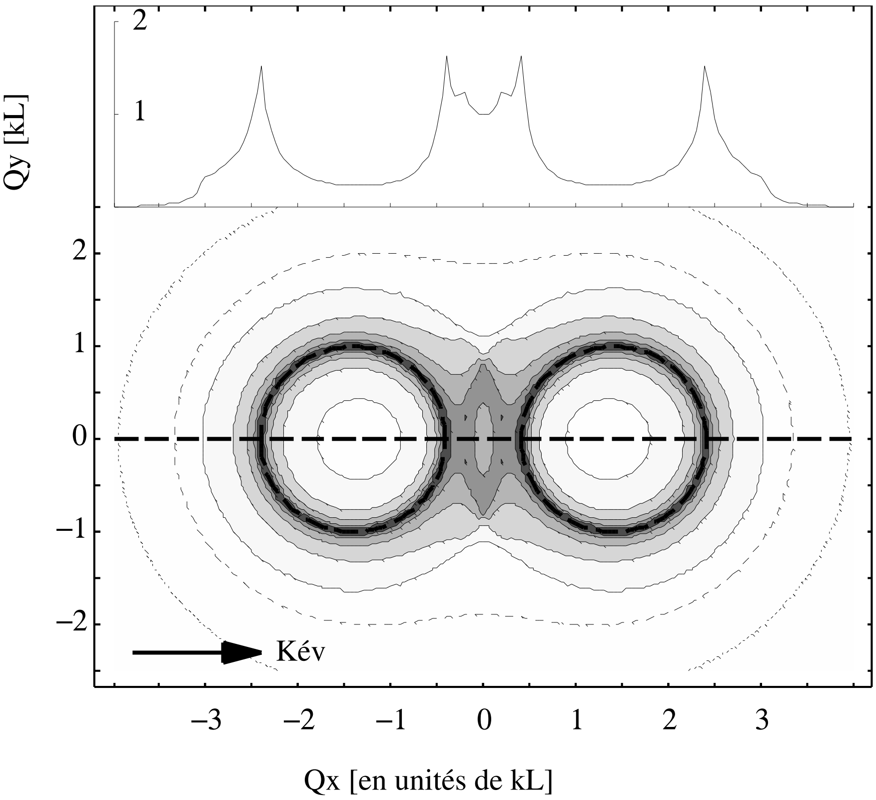

Figure 15.6: Identique à la figure 15.5, mais avec un potentiel dipolaire principal moins fort de sorte que le point de rebroussement se trouve plus près de la surface : $z_{\rm reb} = \frac{1}{2}\kappa^{-1}\log 2$.

$|\mathbf{K}_{\rm év} \pm \mathbf{Q}| \leq k_L$ (voir la figure 15.5). Les contributions significatives de la lumière diffusée à la diffusion de l'atome proviennent alors seulement des ondes planes homogènes et des ondes évanescentes avec une grande profondeur de pénétration. En effet, des fréquences spatiales beaucoup plus grandes que le vecteur d'onde optique k_L créent des ondes lumineuses « très évanescentes » dont l'amplitude au point de rebroussement est très petite. Lorsque le point de rebroussement se rapproche de la surface, la contribution de la lumière évanescente augmente, et la fonction de réponse atomique s'élargit autour des deux cercles (voir la figure 15.6). Dans les deux cas, nous constatons l'anisotropie de la fonction de réponse : elle est plus large dans la direction parallèle au vecteur d'onde de l'onde évanescente principale que dans la direction perpendiculaire.

Finalement, la portée de la fonction de réponse atomique est restreinte à cause de la limite pour le transfert de vecteur d'onde Δk_z donnée par le facteur de recouvrement β. Cette limite du transfert de vecteur d'onde Δk_z n'impose cependant pas de restriction particulièrement sévère en incidence normale parce que le vecteur d'onde vertical ne change qu'au deuxième ordre par rapport au transfert $\mathbf{Q}$ dans le plan. C'est en incidence oblique et rasante que la restriction devient sévère : dans cette géométrie, la conservation d'énergie demande un transfert de vecteur d'onde atomique Δk_z dans la direction normale avec

$$\Delta k_z \simeq -\frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{K}_i}{k_{zi}}, \tag{15.31}$$

où $\mathbf{K}_i$ est le vecteur d'onde atomique incident parallèle au plan. Par conséquent, la réflexion diffuse a presque exclusivement lieu pour des transferts de vecteur d'onde qui sont perpendiculaires au plan d'incidence atomique, $\mathbf{Q} \perp \mathbf{K}_i$, parce que la composante verticale du vecteur d'onde atomique reste alors inchangée. A l'intérieur du plan d'incidence atomique, par contre, la réflexion est quasiment spéculaire. Cette asymétrie est illustrée sur les figures 15.7 et 15.8 où l'atome est incident sous un angle de $45°$. Sur la figure 15.7, l'atome est incident dans le même plan que l'onde évanescente principale ; les contributions des deux cercles sont alors réduits à la partie centrale autour de $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$. Sur la figure 15.8, les plans d'incidence atomique et optique sont perpendiculaires. Les transferts de vecteur d'onde le long de l'axe qui rejoint les deux cercles conservent alors la composante normale du vecteur d'onde atomique de sorte que et les fréquences spatiales importantes se situent autour ce cet axe.

La rugosité effective du miroir

Au § V.3.2 de l'annexe 15.B, nous montrons que la rugosité effective du miroir due au potentiel dipolaire rugueux est du même ordre de grandeur que la rugosité de la surface du diélectrique elle-même. Plus précisément, nous trouvons la surestimation suivante

$$\sigma_{\text{eff}} \lesssim \overline{\sigma}_B \, \mathrm{e}^{\kappa z_{\text{reb}}} = \sqrt{\frac{V_{\max}}{E_{zi}}} \overline{\sigma}_B \tag{15.32}$$

où $\overline{\sigma}_B$ représente la rugosité de la surface dans la gamme de fréquences spectrales déterminée par la portée de la fonction de réponse atomique $B_{\text{at}}(\mathbf{Q})$ (généralement de l'ordre de quelques vecteurs d'onde optiques).

Nous constatons que la rugosité effective augmente avec la distance du point de rebroussement, proportionnellement à $\mathrm{e}^{\kappa z_{\text{reb}}} = (V_{\max}/E_{zi})^{1/2}$. Pour interpréter ceci, nous rappelons que dans la diffraction, les populations non spéculaires sont proportionnelles au contraste de l'onde évanescente stationnaire, donc au rapport entre les parties modulée et non modulée du potentiel dipolaire, et que le même comportement apparaît dans la réflexion diffuse par le potentiel dipolaire rugueux [voir (15.30)]. Cependant, à cause de la lumière diffusée vers le haut, le potentiel rugueux contient des composantes de FOURIER qui décroissent moins vite en fonction de z que le potentiel dipolaire principal. Le potentiel rugueux correspond donc à une onde évanescente stationnaire dont le contraste augmente avec la distance et par conséquent, la probabilité de réflexion diffuse et la rugosité effective augmentent avec z_{reb}.

Nous relevons cependant deux situations où ce raisonnement n'est pas valable et où la rugosité effective est bien inférieure à l'estimation (15.32) : d'une part, il est possible

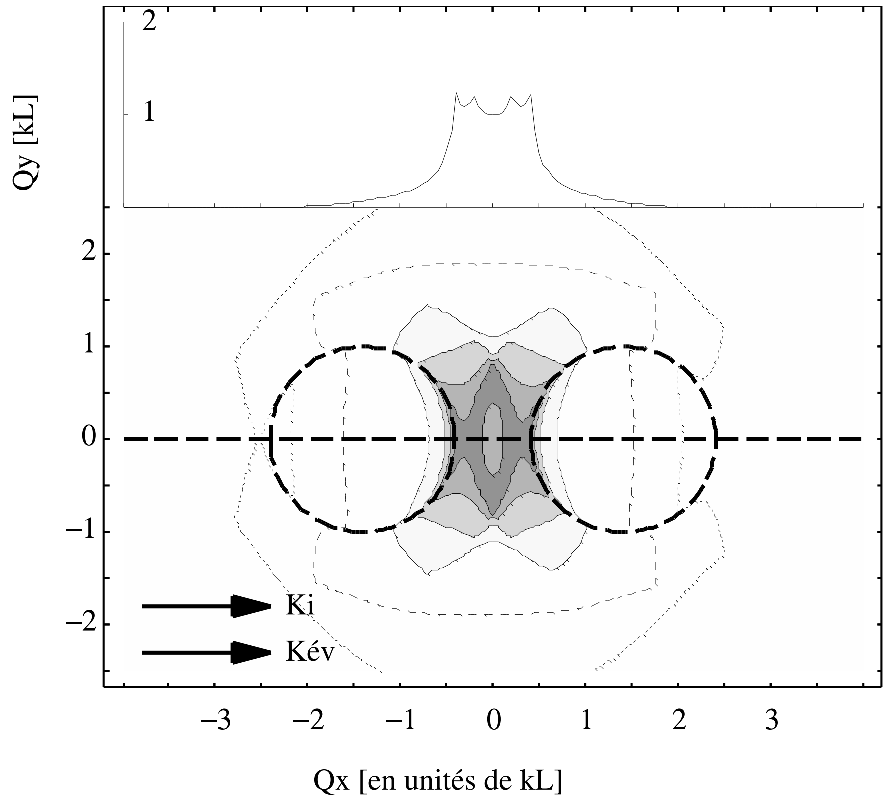

Figure 15.7: Identique à la figure 15.6, mais en incidence oblique. Les atomes sont incidents sous un angle $\theta_i = 45^\circ$ avec une composante de vecteur d'onde normale $k_{zi} = 50\,\kappa$. Le plan d'incidence atomique se confond avec le plan d'incidence de l'onde évanescente principale (le plan xOz) : $\mathbf{K}_i = 50\,\kappa\,\mathbf{e}_x$. A l'intérieur des cercles en tirets épais, des ondes lumineuses homogènes contribuent à la réflexion diffuse des atomes.

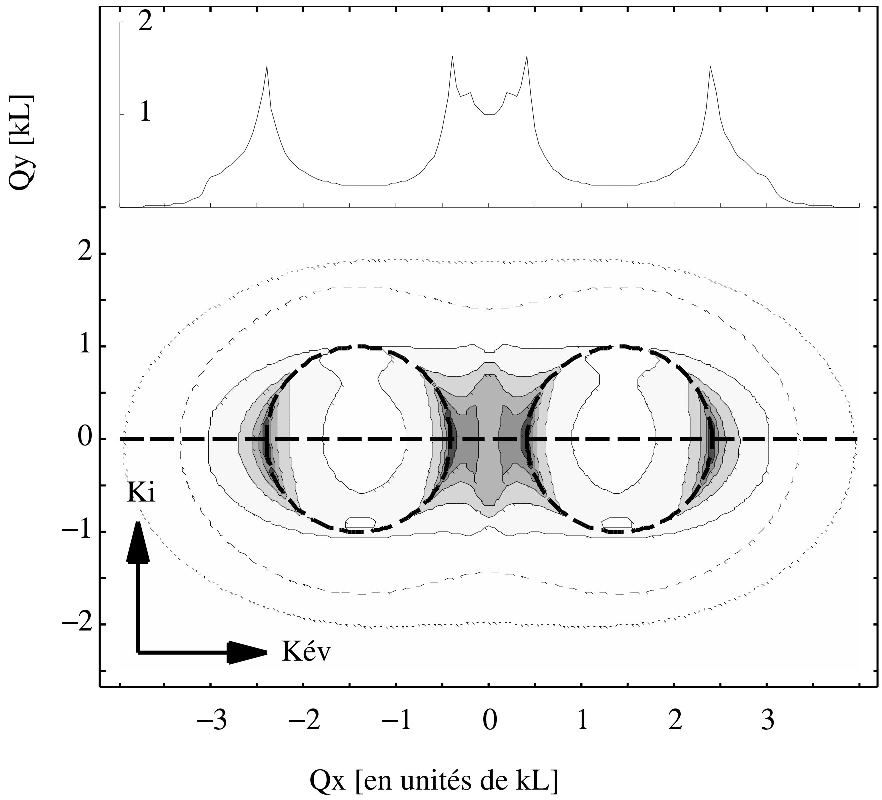

Figure 15.8: Identique à la figure 15.7, mais les atomes sont incidents dans le plan yOz perpendiculaire au plan d'incidence optique (le plan xOz) : $\mathbf{K}_i = 50\,\kappa\,\mathbf{e}_y$.

que la densité spectrale de rugosité ne contienne pas de vecteurs d'onde suffisamment grands ; rappelons ici que la fréquence spatiale minimale nécessaire pour exciter des ondes homogènes vaut en effet $Q = |\mathbf{K}_{\text{év}}| - k_L = q - k_L$ où $q = k_L n_\text{d} \sin\theta_L$ (5.2) est la composante horizontale du vecteur d'onde de l'onde évanescente principale (voir la figure 15.3). D'autre part, en incidence oblique, c'est la fonction de réponse atomique qui supprime une partie des fréquences spatiales qui excitent des ondes homogènes et la rugosité effective s'en trouve réduite. En incidence normale par contre, nous nous attendons à une rugosité effective proche de l'estimation (15.32).

15.3.4 Le régime d'une réflexion complètement diffuse

Lorsque la rugosité effective σ_eff devient du même ordre de grandeur que la longueur d'onde atomique λ_dB, l'approximation de BORN n'est plus valable parce qu'elle donnerait une probabilité de réflexion diffuse supérieure à l'unité. Nous nous attendons alors à ce que la réflexion devienne complètement diffuse. La grandeur physique intéressante est alors la largeur δK_diff en vecteur d'onde de la distribution des atomes réfléchis.

Au § VI de l'annexe 15.B, nous présentons une approche alternative qui permet de décrire le régime d'une réflexion complètement diffuse. Cette approche utilise l'approximation du réseau de phase mince (introduite au chapitre 8) ; nous décrivons l'influence du potentiel rugueux par un déphasage $\delta\varphi\left(\mathbf{R}\right)$ par rapport à la fonction d'onde réfléchie spéculairement [l'équation (**DifR** 6.1)] :

$$\psi_\text{réf}(\mathbf{R}) = \psi^{(0)}_\text{réf}(\mathbf{R}) \exp\left[\mathrm{i}\delta\varphi\left(\mathbf{R}\right)\right]. \tag{15.33}$$

Nous obtenons alors les résultats suivants :

La probabilité totale de réflexion diffuse $w_\text{diff} = (2k_{zi}\sigma_\text{eff})^2$ peut être ré-interprétée dans la limite $\sigma_\text{eff} \gg \lambda_\text{dB}$, où l'approximation de BORN n'est plus valable : elle donne alors la valeur quadratique moyenne des fluctuations de phase de l'onde atomique réfléchie [l'équation (**DifR** 6.15)] :

$$w_\text{diff} = \left\langle [\delta\varphi(\mathbf{R})]^2 \right\rangle \gg 1. \tag{15.34}$$

Dans cette limite, les atomes réfléchis ont une distribution de vecteurs d'onde gaussienne et complètement diffuse, dont la largeur dans le plan xOy est de l'ordre de

$$\delta K_\text{diff} \simeq \sqrt{w_\text{diff}}\, \delta K_\text{Born}, \tag{15.35}$$

où δK_Born est la largeur de la probabilité différentielle de réflexion diffuse dans l'approximation de BORN. La distribution diffuse présente par ailleurs la même anisotropie que pour une diffusion faible (voir aussi M. V. BERRY [83] à ce sujet).

L'équation (15.35) généralise à une onde évanescente rugueuse la relation entre le transfert de vecteur d'onde maximal $\Delta k_x^\text{max} \simeq u_\text{mod}\, 2q$ et l'indice de modulation de phase u_mod pour une modulation de phase forte : le vecteur d'onde $2q$ du réseau de

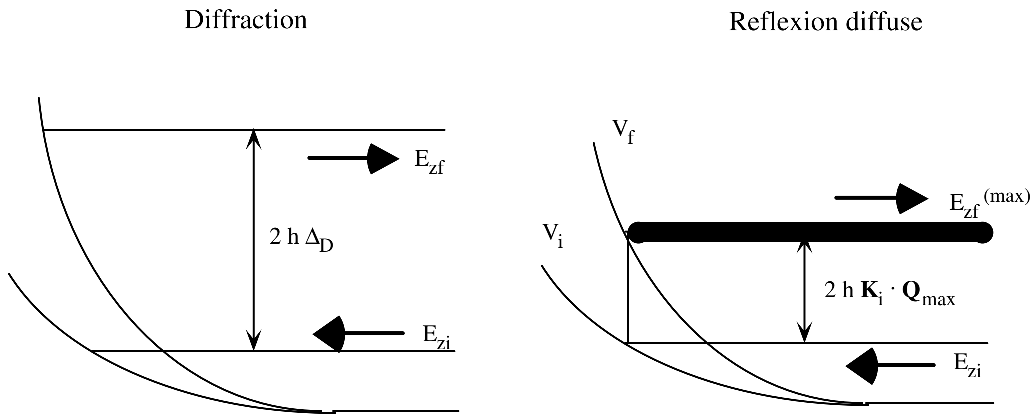

Figure 15.9: Comparaison entre l'effet Sisyphe stimulé pour la diffraction (à gauche) et la réflexion diffuse (à droite).

diffraction correspond alors à la largeur δK_{Born} de la plage de fréquences spatiales du potentiel rugueux qui contribuent à la réflexion diffuse au premier ordre en perturbations ; et l'indice de modulation u_{mod} correspond à l'écart-type $\langle[\delta\varphi(\mathbf{R})]^2\rangle^{1/2} = \sqrt{w_{\mathrm{diff}}}$ des fluctuations de phase de l'onde atomique réfléchie.

15.3.5 Rôle des sous-niveaux magnétiques et de la polarisation de la lumière

Analogie à la diffraction

Jusqu'à maintenant, nous avons considéré le champ lumineux diffusé comme un champ scalaire, en négligeant la polarisation. L'atome lui aussi a été modélisé par un atome à un niveau. Or, dans la réalité en trois dimensions, l'on ne peut faire abstraction de la polarisation de la lumière. C'est pourquoi au § VII de l'annexe 15.B, nous généralisons la théorie de la réflexion diffuse, en tenant compte également des sous-niveaux magnétiques de l'état fondamental de l'atome.

Rappelons que dans la diffraction par l'onde évanescente stationnaire (au paragraphe 11.2), les sous-niveaux magnétiques ont permis de s'affranchir de la coupure $|\Delta k_z| \lesssim \kappa$ pour le transfert de vecteur d'onde atomique dans la direction perpendiculaire au miroir (voir la figure 15.9) : l'atome peut entrer dans l'onde évanescente sur une courbe de potentiel, passer par une transition RAMAN stimulée sur un autre sous-niveau, et sortir sur une courbe de potentiel différente. L'énergie cinétique dans la direction normale change alors par la différence des déplacements lumineux des sous-niveaux (voir la figure 15.9 à gauche).

Dans le contexte du refroidissement laser, ce mécanisme correspond à l'effet Sisyphe identifié par C. COHEN-TANNOUDJI et J. DALIBARD [28, 29]. Le changement d'énergie provient alors de l'émission spontanée d'un photon avec une fréquence différente de la fréquence laser. L'effet Sisyphe spontané a été étudié aussi pour des atomes alcalins réfléchis par une onde évanescente, en tenant compte de transitions spontanées entre les niveaux hyperfins de l'état fondamental [153, 154, 155, 156, 157]. Dans notre situation, l'effet Sisyphe est stimulé, et l'énergie est conservée. Ceci n'est possible que parce que la transition RAMAN permet une conversion entre l'énergie potentielle interne (les déplacements lumineux) et l'énergie cinétique dans la direction *parallèle* au réseau (qui correspond au décalage DOPPLER $2\hbar\Delta_D$ dans le référentiel de l'atome). Le principe de FRANCK–CONDON implique que la probabilité pour un tel processus Sisyphe stimulé est maximale lorsque les points de rebroussement des fonctions d'onde dans les deux potentiels coïncident. Comme l'énergie cinétique normale E_{zf} de l'état final est fixée par les vecteurs d'onde diffractés k_{zn}, le principe de FRANCK–CONDON permet d'estimer si le transfert de population vers un autre sous-niveau est efficace. Sur la figure 15.9 à gauche, les points de rebroussement des états initial et final ne coïncident pas, la population diffractée sera donc plus faible que le maximum, tout en étant non nulle.

Pour la réflexion diffuse par contre, un continuum d'énergies finales E_{zf} est accessible dans la direction verticale parce que le potentiel rugueux offre une distribution continue de réseaux de diffraction (voir la figure 15.9 à droite). Le principe de FRANCK–CONDON permet alors d'identifier les fréquences spatiales $\mathbf{Q}_{\max}$ pour lesquelles la probabilité de réflexion diffuse est maximale, parce qu'elles couplent des états initial et final dont les points de rebroussement se recouvrent.

Plus précisément, considérons un processus où l'atome entre avec une énergie cinetique E_{zi} dans l'onde évanescente sur un niveau avec le déplacement lumineux $V_i^{(0)}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}$ et sort sur le niveau $V_f^{(0)}\,\mathrm{e}^{-2\kappa z}$. Parmi toutes les énergies finales E_{zf}, le principe de FRANCK–CONDON permet d'identifier une énergie cinétique finale particulière, $E_{zf}^{(\max)}$, pour laquelle les points de rebroussement classiques des états initial et final coïncident. L'énergie $E_{zf}^{(\max)}$ est donc fixée par [voir aussi (11.33)] :

$$\frac{V_i^{(0)}}{V_f^{(0)}} = \frac{E_{zi}}{E_{zf}^{(\max)}}, \tag{15.36}$$

Notons que $E_{zf}^{(\max)}$ dépend seulement de l'énergie incidente E_{zi} et du rapport des déplacements lumineux. Le transfert de vecteur d'onde $\mathbf{Q}_{\max}$ parallèle au miroir qui est nécessaire pour conserver l'énergie est alors déterminé par

$$\frac{\hbar^2}{2M}\left[(\mathbf{K}_i + \mathbf{Q}_{\max})^2 - \mathbf{K}_i^2\right] = E_{zi} - E_{zf}^{(\max)}, \tag{15.37}$$

où $\mathbf{K}_i$ est le vecteur d'onde atomique incident parallèle au miroir.

Nous illustrons cet effet, la « réflexion diffuse amplifiée par effet Sisyphe stimulé », sur les figures 15.11 à 15.14. Nous prenons l'exemple d'une transition $J = 1 \to$

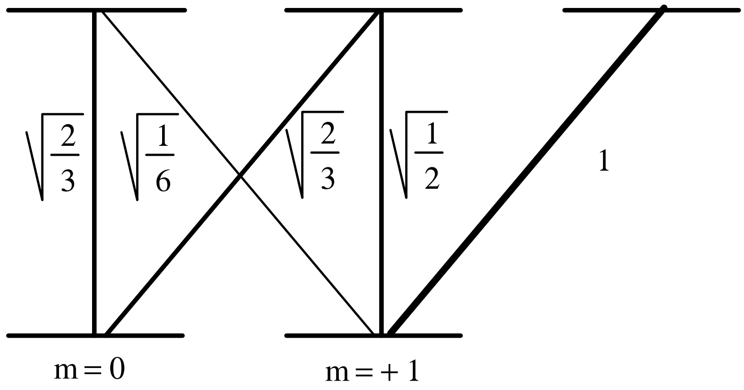

Figure 15.10: Coefficients de CLEBSCH–GORDON *pour une transition* $J = 1 \to J_e = 2$. *A cause de la symétrie des coefficients par rapport à* $m = 0$, *seuls ceux avec* $m \geq 0$ *sont représentés.*

$J_e = 2$ et d'une onde évanescente en polarisation linéaire s (ou *TE*). Pour un axe de quantification parallèle au champ électrique, les sous-niveaux $|m = 0, \pm 1\rangle$ sont des états propres de l'opérateur du déplacement lumineux. Leurs déplacements sont donnés par les carrés des coefficients de CLEBSCH–GORDAN de la figure 15.10. Pour un atome incident dans l'état $|m_i = +1\rangle$ et diffusé vers $|m_f = 0\rangle$, l'équation (15.36) et les coefficients de la figure 15.10 montrent que le maximum de l'efficacité de la réflexion diffuse correspond à un vecteur d'onde final dont la composante verticale vaut

$$k_{zf}^{(\max)} = \sqrt{\frac{4}{3}} k_{zi}. \tag{15.38}$$

Notons que pour un vecteur d'onde incident semi-classique, ceci implique un changement de vecteur d'onde considérable à l'échelle du vecteur d'onde optique k_L.

Cependant, à cause de la conservation de l'énergie et du moment angulaire, deux conditions sont nécessaires pour réaliser l'effet Sisyphe stimulé dans l'onde évanescente rugueuse :

- d'une part, il faut que l'atome interagisse avec une onde lumineuse de polarisation différente de l'onde évanescente principale, pour pouvoir changer de sous-niveau magnétique ;
- d'autre part, il faut que le potentiel dipolaire rugueux fournisse le transfert de vecteur d'onde $\mathbf{Q}_{\max}$ exigé par la conservation de l'énergie (15.37).

Conséquences du changement de sous-niveau

Nous donnons aux équations (**DifR** B1, B2) les vecteurs de polarisation pour les composantes de FOURIER du champ lumineux diffusé [158]. Pour une polarisation incidente parallèle à l'axe Oy, la lumière diffusée à l'intérieur du plan d'incidence optique (le plan xOz) est également polarisée parallèle à l'axe Oy, pour des raisons de

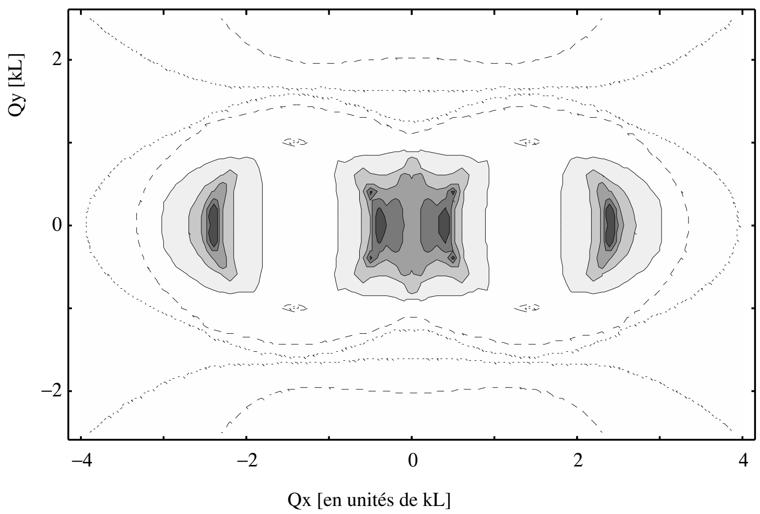

Figure 15.11: Fonction de réponse atomique (lignes de niveaux) pour la réflexion diffuse vers le même sous-niveau $|m_i = +1\rangle \to |m_f = +1\rangle$.
Le point de rebroussement se trouve à la distance $z_{\rm reb} = \frac{1}{2}\kappa^{-1}\log 2$, et les atomes sont incidents en incidence normale avec $k_{zi} = 50\,\kappa$. Le vecteur d'onde de l'onde évanescente principale vaut $\mathbf{K}_{\text{év}} = \sqrt{2}\,k_L\,\mathbf{e}_x$, et nous avons choisi $\kappa = k_L$.

symétrie. La réflexion diffuse de l'atome par ces modes lumineux n'induit donc pas de changement de sous-niveau. Les transferts de vecteur d'onde $\mathbf{Q}$ sont alors parallèles à l'axe Ox. Ce sont seulement des modes lumineux qui se propagent en dehors du plan d'incidence optique, qui ont des composantes de polarisation $\sigma_\pm$ susceptibles d'induire une transition RAMAN vers un autre sous-niveau. L'atome encaisse alors un transfert de vecteur d'onde $\mathbf{Q}$ en dehors de l'axe Ox.

La figure 15.11 montre en effet que la probabilité de diffusion sans changement d'état interne (le processus $|m_i = +1\rangle \to |m_f = +1\rangle$) est concentrée autour de l'axe Ox, parallèle au vecteur d'onde $\mathbf{K}_{\text{év}}$ de l'onde évanescente principale. Près de l'axe, la probabilité de diffusion ressemble au résultat du modèle scalaire (comparer à la figure 15.6). Sur la figure 15.12, nous constatons que la probabilité de diffusion pour l'autre état final $|m_f = 0\rangle$ s'annule sur l'axe Ox. L'interprétation de l'asymétrie de la figure 15.12 par rapport aux directions parallèle et anti-parallèle à l'axe Ox dépasse le cadre de notre exemple ; notons seulement que nous avons déjà constaté une brisure de symétrie analogue pour une onde évanescente en polarisation *TM* qui se propage le long de l'axe Ox : sa composante de polarisation σ_- plus est forte que la composante σ_+ [voir (11.24)].

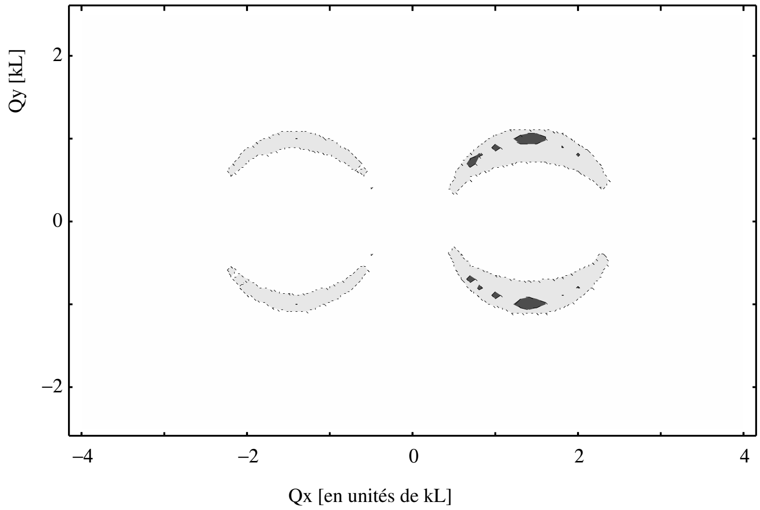

Figure 15.12: Identique à la figure 15.11, mais pour un état final différent : $|m_i = +1\rangle \to |m_f = 0\rangle$.

Conséquences de la conservation d'énergie

Sur les figures 15.11 et 15.12, l'atome est incident en incidence normale. La conservation d'énergie implique alors que le transfert de vecteur d'onde dans la direction normale au miroir est du deuxième ordre par rapport au transfert de vecteur d'onde parallèle au plan, et généralement très petit devant le vecteur d'onde optique. Par conséquent, la réflexion diffuse n'est pas amplifiée par l'effet Sisyphe stimulé. En effet, il faudrait des transferts de vecteur d'onde $|\mathbf{Q}| \sim k_{zi}$, beaucoup plus grand que le vecteur d'onde optique, pour que le changement de l'énergie cinétique dans la direction normale soit suffisamment grand de façon à ce que les points de rebroussement dans les deux potentiels se recouvrent, comme nous l'avons supposé aux équations (15.36, 15.37). De telles fréquences spatiales correspondraient à des ondes lumineuses extrèmement évanescentes dont l'amplitude est négligeable aux distances qu'explore l'atome. L'amplification de la réflexion diffuse par l'effet de FRANCK–CONDON ne peut donc avoir lieu en incidence normale.

Sur les figures 15.13 et 15.14, nous nous plaçons en incidence oblique et présentons la fonction de réponse atomique pour un atome incident dans le plan xOz. La figure 15.13 montre la probabilité de diffusion sans changement d'état interne, et nous constatons qu'elle ressemble de près au résultat de la théorie scalaire (la figure 15.7) : les transferts de vecteur d'onde dans la direction Ox sont supprimés. Si par contre l'atome change de sous-niveau et sort dans l'état $|m_f = 0\rangle$ (la figure 15.14), une réflexion diffuse avec un grand transfert de vecteur d'onde est possible. Pour les paramètres de la figure, le changement de la composante normale du vecteur d'onde atomique va jusqu'à $\Delta k_z^{(\max)} = (\sqrt{4/3} - 1)\, k_{zi} \simeq 7.2\,\kappa$. Observons pour finir sur la

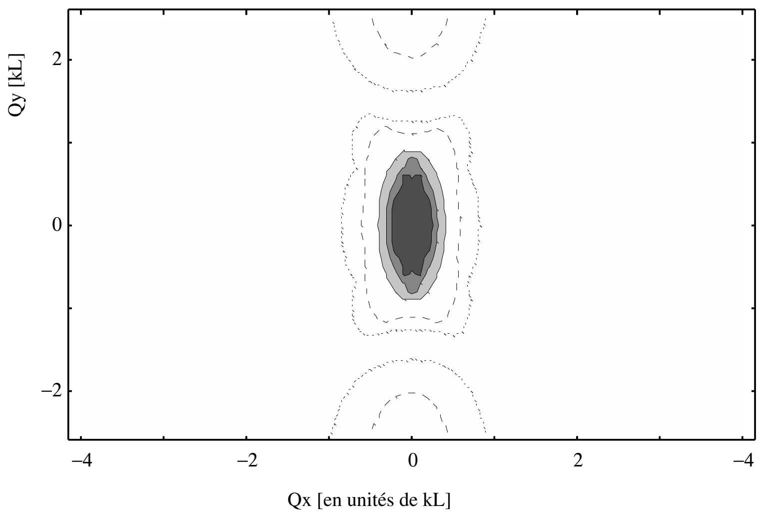

Figure 15.13: Probabilité de réflexion diffuse en incidence oblique, sans changement d'état interne ($|m_i = +1\rangle \to |m_f = +1\rangle$).
L'atome est incident dans le plan xOz (vecteur d'onde $\mathbf{K}_i$ parallèle au vecteur d'onde $\mathbf{K}_{\text{év}}$ de l'onde évanescente principale), sous un angle $\theta_i = 70°$. Les autres paramètres sont identiques à la figure 15.11.

figure 15.14 que la probabilité de diffusion s'annule pour certains transferts de vecteur d'onde, marqués «A» sur la figure. Ce phénomène correspond aux oscillations de STÜCKELBERG que nous avons observées dans les probabilités de diffraction au chapitre 11.2 [à l'équation (11.30)].

Conclusion

Nous avons étudié deux mécanismes pour une interaction indirecte entre l'atome réfléchi par le miroir à onde évanescente et la surface rugueuse du diélectrique : d'une part, la correction au potentiel d'interaction de VAN DER WAALS due au profil de la surface, et d'autre part, le potentiel dipolaire rugueux créé par l'interférence entre l'onde évanescente principale et la lumière diffusée par la surface rugueuse. Les deux mécanismes font apparaître des potentiels rugueux dans le champ proche, et bien que ceux-ci soient faibles devant le potentiel dipolaire de l'onde évanescente, ils rendent diffuse la réflexion des atomes parce que la longueur d'onde atomique est généralement beaucoup plus petite que la profondeur de pénétration de l'onde évanescente. Nous avons relié la probabilité différentielle de réflexion diffuse w_{diff} au spectre de rugosité de la surface rugueuse, par le moyen d'une fonction de réponse atomique.

Deux régimes pour la réflexion diffuse ont été identifiés: dans le régime quasi-

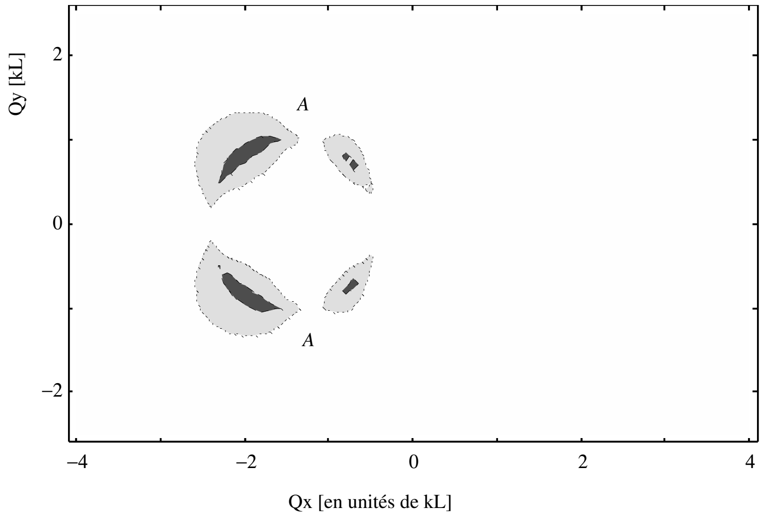

Figure 15.14: Identique à la figure 15.13, mais pour un sous-niveau final différent $|m_f = 0\rangle$.

spéculaire, la probabilité de diffusion w_{diff} est faible, et une grande fraction d'atomes est réfléchie spéculairement. Ce régime peut être caractérisé par l'approximation de BORN. La partie diffuse de la distribution de vitesse réfléchie est alors donnée par le produit de la densité spectrale et la fonction de réponse atomique. Nous avons trouvé qu'elle a généralement une largeur de l'ordre de quelques vitesses de recul au plus. Pour une vitesse incidente beaucoup plus grande que la vitesse de recul, la divergence angulaire de la réflexion diffuse est donc relativement faible. Dans le deuxième régime d'une réflexion fortement diffuse, la composante spéculaire est absente de la distribution de vitesse. La largeur de celle-ci est augmentée par un facteur $w_{\text{diff}}^{1/2}$, où w_{diff} est encore donné par la fonction de réponse atomique calculée dans l'approximation de BORN, mais son interprétation physique est reliée aux fluctuations de phase des atomes réfléchis.

Comparaison entre les deux mécanismes

De façon générale, nous constatons que le potentiel de VAN DER WAALS rugueux est plus petit en valeur absolue que le potentiel dipolaire rugueux. Les deux potentiels deviennent seulement comparables à une position près du sommet de la barrière de potentiel du miroir. Aussi les deux mécanismes sont-ils sensibles à des fréquences spatiales différentes : pour le potentiel de VAN DER WAALS rugueux, la fonction de réponse est isotrope et présente une fréquence de coupure de l'ordre de $\delta Q \lesssim 1/z_{\text{reb}}$; elle devient plus étroite lorsque le point de rebroussement s'éloigne de la surface. Pour le potentiel dipolaire rugueux par contre, la fonction de réponse a une largeur

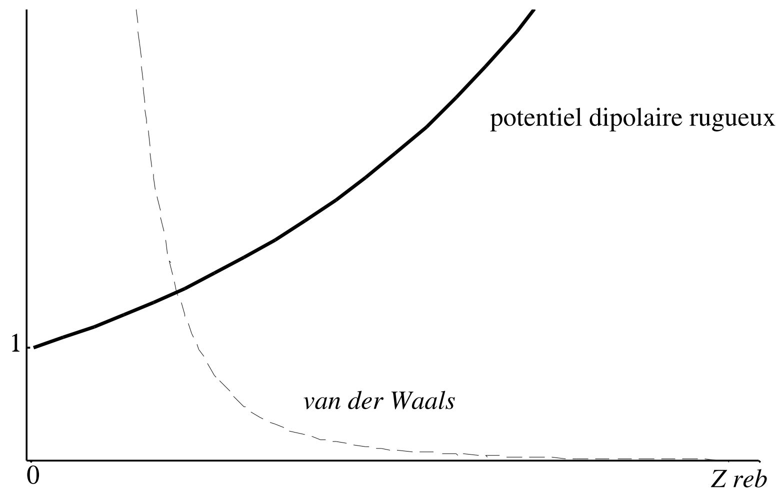

Figure 15.15: Estimations pour les contributions du potentiel de VAN DER WAALS *rugueux (tirets) et du potentiel dipolaire rugueux (trait plein) à la rugosité effective du miroir à onde évanescente. Les courbes représentent le rapport $\sigma_{\rm eff}/\sigma$ pour une densité spectrale constante.*

fixe de l'ordre du vecteur d'onde optique, $\delta Q \sim k_L$, si le point de rebroussement est loin de la surface, $\kappa z_{\rm reb} \gtrsim 1$. Elle présente en outre une anisotropie, étant plus large dans la direction parallèle au vecteur d'onde de l'onde évanescente principale. Ceci provient du fait que l'onde évanescente participe toujours au transitions RAMAN qui font diffuser l'atome. Notons qu'une telle anisotropie de la distribution de vitesse des atomes réfléchis semble avoir été observée effectivement dans l'expérience par notre groupe.[11]

Nous avons caractérisé la spécularité de la réflexion par la rugosité effective $\sigma_{\rm eff}$ du miroir à atomes, par analogie au miroir parfait rugueux [l'équation (14.19)]. Les deux mécanismes d'interaction avec la surface rugueuse donnent des rugosités effectives qui dépendent de façon différente de la distance du point de rebroussement (voir la figure 15.15). Pour le potentiel de VAN DER WAALS rugueux, $\sigma_{\rm eff}$ est inférieure à la rugosité σ de la surface diélectrique, par un facteur de l'ordre du rapport entre le potentiel de VAN DER WAALS et le potentiel dipolaire principal au point de rebroussement [l'équation (15.27)]. La rugosité effective du potentiel dipolaire rugueux par contre, est du même ordre que σ. Elle augmente même avec la distance $z_{\rm reb}$ du point de rebroussement [voir (15.32)] si le champ lumineux diffusé contient une contribution importante d'ondes planes homogènes (la situation représentée sur la figure 15.15). Une telle situation semble plus proche de la réalité parce que la densité spectrale de la surface rugueuse décroît lentement, comme une loi de puissance, pour des fréquences

[11] G. HORVATH, G. LABEYRIE, A. LANDRAGIN, communication privée (1996).

spatiales autour du vecteur d'onde optique.

Si finalement le champ lumineux diffusé est dominé par des modes évanescents avec la même profondeur de pénétration que l'onde évanescente principale, la rugosité effective du miroir est approximativement indépendante de la distance du point de rebroussement. Cette situation peut se produire lorsque l'on utilise un système d'exaltation pour l'onde évanescente [18, 17, 93, 20], parce que l'on exalte en même temps les modes du champ lumineux diffusé avec la même longueur de décroissance que l'onde évanescente principale.

Quasi-conservation de la composante normale du vecteur d'onde atomique

L'épaisseur non nulle de l'ordre de $1/\kappa$ du potentiel dipolaire rugueux implique une coupure pour le transfert de vecteur d'onde atomique dans la direction normale au miroir, qui est de l'ordre de κ. Bien que nous ne disposions pas d'un résultat analytique pour les éléments de matrice du potentiel de VAN DER WAALS rugueux, nous nous attendons à ce qu'une coupure analogue y apparaisse aussi ; elle sera même encore plus stricte vu que ce potentiel a une portée plus longue en fonction de z. L'impact de la coupure est cependant assez différent en incidence oblique par rapport à l'incidence normale. En incidence normale, le changement de vecteur d'onde Δk_z imposé par la conservation de l'énergie est faible. Nous montrons dans l'annexe 15.B que l'on peut alors en effet faire abstraction de l'épaisseur non nulle de l'onde évanescente en incidence normale, et décrire le miroir à onde évanescente par un miroir parfait rugueux, comme au chapitre 14. L'on obtient une bonne description pour la réflexion diffuse en prenant un miroir rugueux dont la surface est donnée par la « surface de rebroussement » où le potentiel dipolaire est égal à l'énergie incidente. Cette surface permet également d'interpréter le régime diffus par une réflexion localement spéculaire sur la surface de rebroussement, comme pour un ensemble de particules classiques.

En incidence oblique, la quasi-conservation de la composante normale du vecteur d'onde atomique supprime la réflexion diffuse dans le plan d'incidence atomique. L'atome n'est alors sensible qu'aux fréquences spatiales du potentiel rugueux qui sont perpendiculaires au vecteur d'onde atomique incident. Cette situation change lorsque l'on introduit la structure magnétique de l'état fondamental atomique dans la théorie. Comme dans la « diffraction assistée par sous-niveaux magnétiques » (chapitre 11.2), de grands transferts de vecteurs d'onde dans la direction normale sont possibles lorsque la réflexion diffuse s'accompagne d'une transition vers un état interne avec un déplacement lumineux différent. Cet effet Sisyphe stimulé se produit lorsque le champ lumineux contient des composantes de polarisation différentes de l'onde évanescente principale. Il est en outre nécessaire de se placer en incidence oblique pour que le potentiel rugueux, par un transfert de vecteur d'onde modeste dans le plan parallèle au miroir, puisse compenser le changement d'énergie cinétique dans la direction normale.

Remarque. Notons que l'on peut étudier l'amplification de la réflexion diffuse par effet Sisyphe stimulé en incidence normale, si l'onde évanescente principale contient deux fréquences $\omega_{1,2}$ différentes. Pour réaliser la diffraction assistée par sous-niveaux magnétiques, l'on choisira des polarisations différentes pour les deux fréquences. Lorsque les polarisations sont identiques, par contre, c'est seulement le champ diffusé par la surface qui peut induire la transition RAMAN nécessaire pour l'effet Sisyphe stimulé. Par exemple, l'atome peut absorber un photon de l'onde évanescente principale de fréquence ω_1 et de vecteur d'onde $\mathbf{K}_{\text{év}}$, et émettre de façon stimulée un photon de fréquence ω_2 et de vecteur d'onde $\mathbf{K}'_L = \mathbf{K}_{\text{év}} + \mathbf{Q}$ dans le champ diffusé par l'autre onde principale.[12] L'énergie de l'atome change alors par $\hbar\delta \equiv \hbar(\omega_1 - \omega_2)$, de sorte que nous avons (en incidence normale)

$$\frac{\hbar^2}{2M}\left(\mathbf{Q}^2 + k_{zf}^2\right) = \frac{\hbar^2}{2M}k_{zi}^2 + \hbar\delta. \tag{15.39}$$

A cause du principe de FRANCK–CONDON, ce processus se produit avec une grande probabilité lorsque le vecteur d'onde final k_{zf} est égal à la valeur optimale $k_{zf}^{(\max)}$ fixée par la différence des déplacements lumineux (15.36). L'équation (15.39) permet alors d'ajuster le transfert de vecteur d'onde $\mathbf{Q}_{\max}$ parallèle au miroir en fonction de la différence de fréquences δ. En comparant les équations (15.37) et (15.39), nous constatons que δ joue le rôle du décalage DOPPLER $2\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{Q}$ de l'incidence oblique.

[12] Les fréquences $\omega_{1,2}$ seront généralement très voisines de sorte que nous pouvons confondre les vecteurs d'onde optiques $\omega_{1,2}/c = k_L$.

Annexe

15.A Estimation de la fonction de réponse atomique pour le potentiel de VAN DER WAALS rugueux

Nous allons estimer ici l'élément de matrice (15.24) qui intervient dans la fonction de réponse atomique pour le potentiel rugueux de VAN DER WAALS :

$$\langle \phi_{k_{zf}}(z) | F_{\mathrm{vdW}}(\mathbf{Q}, z) \, | \phi_{k_{zi}}(z) \rangle \tag{15.A.1}$$

Rappelons à cet effet que les fonctions d'onde $\phi_{k_{z,if}}(z)$ sont négligeables dans la région classiquement interdite $z < z_{\mathrm{reb}}$ au-delà du point de rebroussement classique.[13] Dans la région $z > z_{\mathrm{reb}}$, le produit $\phi_{k_{zf}}(z)\, \phi_{k_{zi}}(z)$ est de l'ordre de l'unité, et compte tenu des oscillations de cette fonction qui tendent à réduire la valeur de l'intégrale, nous pouvons la surestimer par l'unité.

Notons encore que l'intégrand dans l'élément de matrice (15.A.1) prend sa valeur maximale autour du point de rebroussement z_{reb}. La valeur de l'intégrale est donc déterminée par le produit Qz_{reb} qui intervient dans la fonction de réponse $F_{\mathrm{vdW}}(\mathbf{Q}, z_{\mathrm{reb}})$ [voir (15.13)]. Nous pouvons distinguer entre deux situations limites:

1. pour $Qz_{\mathrm{reb}} \gg 1$, le comportement asymptotique (15.14b) est valable sur tout l'intervalle d'intégration $z = z_{\mathrm{reb}} \ldots + \infty$. La contribution dominante à l'intégrale provient de la région autour du point de rebroussement, dont l'étendue caractéristique est $l_z \sim 1/Q$, à cause de la portée en z de la fonction de transfert $F_{\mathrm{vdW}}(\mathbf{Q}, z)$ (15.14b). Nous trouvons alors la surestimation suivante:

$$Qz_{\mathrm{reb}} \gg 1 : \qquad \left| \langle \phi_{k_{zf}}(z) | F_{\mathrm{vdW}}(\mathbf{Q}, z) \, | \phi_{k_{zi}}(z) \rangle \right| \lesssim \frac{1}{Q} F_{\mathrm{vdW}}(\mathbf{Q}, z_{\mathrm{reb}}). \tag{15.A.2}$$

2. dans la limite opposée $Qz_{\mathrm{reb}} \ll 1$, le comportement asymptotique (15.14a) est valable dans l'intervalle $z \simeq z_{\mathrm{reb}} \ldots 1/Q$. Nous nous en servons pour calculer l'intégrale, ce qui donne le résultat:

$$\begin{aligned} Qz_{\mathrm{reb}} \ll 1 : \qquad \left| \langle \phi_{k_{zf}}(z) | F_{\mathrm{vdW}}(\mathbf{Q}, z) \, | \phi_{k_{zi}}(z) \rangle \right| &\lesssim \left| \frac{c_3}{z_{\mathrm{reb}}^3} - c_3 Q^3 \right| \\ &\simeq \frac{c_3}{z_{\mathrm{reb}}^3} \simeq \frac{z_{\mathrm{reb}}}{3} F_{\mathrm{vdW}}(\mathbf{Q}, z_{\mathrm{reb}}). \end{aligned} \tag{15.A.3}$$

La contribution de l'intervalle $z \simeq 1/Q \ldots + \infty$ à l'intégrale est de l'ordre de $(1/Q) F_{\mathrm{vdW}}(\mathbf{Q}, 1/Q) \simeq c_3 Q^3$, ce qui est négligeable devant le terme donné à (15.A.3).

[13] Pour les besoins de cette estimation, nous supposons que les points de rebroussement des fonctions d'onde $\phi_{k_{z,if}}(z)$ sont proches.

15.B *Diffuse atomic reflection at a rough mirror* (DifR)

Dans cette article, nous étudions de façon détaillée l'influence du potentiel rugueux crée par l'interférence entre l'onde évanescente et la lumière diffusée par la surface du diélectrique. Le lecteur y trouvera en particulier la généralisation de l'approche de RAYLEIGH à une interface diélectrique–vide (§ III) dont nous nous servons pour calculer le champ lumineux diffusé. Dans l'article, nous nous concentrons sur l'approximation scalaire pour le champ lumineux. A l'annexe § B, nous donnons le champ lumineux diffusé en tenant compte de la polarisation.

Ce papier a été publié dans la *Physical Review A* **55** (1997) 1160.

Chapitre 16

Diffusion d'atomes dans le potentiel dipolaire aléatoire du champ lointain

Dans ce chapitre, nous voudrions analyser comment le mouvement d'un atome est modifié par le champ lumineux diffus qui se trouve dans le demi-espace au-dessus de la surface diélectrique. A la différence du chapitre 15, nous nous plaçons donc dans la région asymptotique loin de la surface du diélectrique. Le champ lumineux présent dans cette région existe parce que le faisceau lumineux qui crée l'onde évanescente stationnaire, est diffusé par la surface rugueuse du diélectrique. L'atome traverse ce champ avant (et après) la réflexion par le miroir et interagit avec lui par le potentiel dipolaire $V^{(2)}(\mathbf{r})$ (15.5).

Nous étudions d'abord les propriétés statistiques du potentiel $V^{(2)}(\mathbf{r})$ et présentons comment l'on peut poser le problème du mouvement de l'atome dans un tel potentiel. Nous identifions ensuite de façon qualitative les grandeurs physiques qui caractérisent la diffusion de l'atome.

Nous appelerons dans ce chapitre le potentiel $V^{(2)}(\mathbf{r})$ *potentiel dipolaire aléatoire*.

16.1 Propriétés statistiques du potentiel dipolaire aléatoire

Pour calculer le potentiel dipolaire aléatoire $V^{(2)}(\mathbf{r})$, nous nous servons du champ lumineux diffusé $E^{(1)}(\mathbf{r})$ dans l'approximation scalaire qui est donné par l'expression (**DifR** 3.1). Nous obtenons alors le résultat suivant pour sa valeur moyenne [en utilisant la fonction de corrélation (13.21)]

$$\langle V^{(2)}(\mathbf{r})\rangle = \kappa^2 V_{\max} \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{K}}{(2\pi)^2}\, |f(\mathbf{K})|^2\, \mathcal{P}_s(\mathbf{K}-\mathbf{K}_{\text{év}})\, \exp\left(-2\,\mathrm{Im}\, k_z z\right), \qquad (16.1)$$

où $f(\mathbf{K})$ est donné en (**DifR** 3.6), $\mathcal{P}_s(\mathbf{Q})$ est la densité spectrale, $(\mathbf{K}, k_z)$ est le vecteur d'onde lumineux diffusé et $\mathbf{K}_{\text{év}}$ le vecteur d'onde de l'onde évanescente principale. Comme les ondes évanescentes (k_z imaginaire) ne contribuent plus au champ lumineux dans la région asymptotique loin de la surface, l'intégrale (16.1) est en fait limitée aux ondes planes homogènes ($|\mathbf{K}| \leq k_L$) pour laquelle la composante k_z est réelle. Il s'ensuit que la valeur moyenne $\langle V^{(2)}(\mathbf{r}) \rangle$ du potentiel dipolaire aléatoire est spatialement constante. Nous l'écrivons sous la forme

$$\langle V^{(2)}(\mathbf{r}) \rangle = \eta V_{\max} \tag{16.2}$$

Le coefficient de perte par diffusion optique η donne la fraction d'intensité diffusée vers le demi-espace $z > 0$. Il est de l'ordre de $(k_L \overline{\sigma})^2$, où $\overline{\sigma}^2$ s'exprime par une intégrale du spectre de rugosité sur les fréquences spatiales $\mathbf{Q}$ avec $|\mathbf{K}_{\text{év}} + \mathbf{Q}| < k_L$ (voir la figure 15.3).

Le potentiel dipolaire aléatoire est généralement beaucoup plus petit que le potentiel dipolaire $V_{\max}$ à la surface du diélectrique ($\eta \ll 1$). Par conséquent, il est une faible perturbation par rapport à l'énergie cinétique normale E_z des atomes qui le traversent. Mais comme il présente des gradients, il contribue néanmoins à la diffusion de l'atome. Pour estimer ses gradients, il faut calculer la fonction de corrélation

$$C_{V^{(2)}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \langle V^{(2)}(\mathbf{r}_1) V^{(2)}(\mathbf{r}_2) \rangle - \langle V^{(2)}(\mathbf{r}_1) \rangle \, \langle V^{(2)}(\mathbf{r}_2) \rangle, \tag{16.3}$$

ce qui donne la double intégrale

$$\begin{aligned} &C_{V^{(2)}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \\ &\int \frac{\mathrm{d}\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \frac{\mathrm{d}\mathbf{K}'}{(2\pi)^2} \mathcal{P}_s(\mathbf{K} - \mathbf{K}_{\text{év}}) \mathcal{P}_s(\mathbf{K}' - \mathbf{K}_{\text{év}}) \exp \mathrm{i} \left[(\mathbf{K}' - \mathbf{K}) \cdot (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1) \right] \times \\ &\times \Big\{ |f(\mathbf{K})|^2 \, |f(\mathbf{K}')|^2 \, \exp \mathrm{i} [(k_z - k'_z)(z_2 - z_1)] + \\ &\qquad + f^*(\mathbf{K}) \, f^*(\mathbf{K}_{(-)}) \, f(\mathbf{K}') \, f(\mathbf{K}'_{(-)}) \times \\ &\qquad\quad \times \exp \mathrm{i} \left[(k'_{z(-)} - k_{z(-)}) z_2 + (k'_z - k_z) z_1 \right] \Big\} \,. \end{aligned} \tag{16.4}$$

Dans cette expression, les vecteurs d'onde avec l'indice $(-)$ correspondent à $\mathbf{K}_{(-)} = 2\mathbf{K}_{\text{év}} - \mathbf{K}$, et $k_{z(-)}$ est la composante verticale correspondante.[1]

La fonction de corrélation (16.4) permet d'estimer la longueur de corrélation ℓ_c du potentiel dipolaire aléatoire. Nous supposons pour simplifier que la densité spectrale $\mathcal{P}_s(\mathbf{K} - \mathbf{K}_{\text{év}})$ varie peu dans le domaine d'intégration des vecteurs d'onde $\mathbf{K}, \mathbf{K}'$. Les différences de vecteur d'onde $\mathbf{K} - \mathbf{K}'$ et $k_z - k'_z$ dans les exponentielles de (16.4) sont au plus de l'ordre de k_L. Par conséquent, la longueur de corrélation est donnée par

$$\ell_c \simeq 1/k_L, \tag{16.5}$$

elle est donc de l'ordre de la longueur d'onde optique. Nous retrouvons là la taille-type des tavelures (*speckle*) dans un champ lumineux lorsque la source apparaît sous

[1]Ces vecteurs d'onde proviennent de la corrélation non nulle entre les amplitudes $E(\mathbf{K}_{\text{év}} + \mathbf{Q})$ et $E^*(\mathbf{K}_{\text{év}} - \mathbf{Q})$ qui sont toutes les deux proportionnelles au coefficient de FOURIER $S(\mathbf{Q})$ [voir (**DifR** 3.1)].

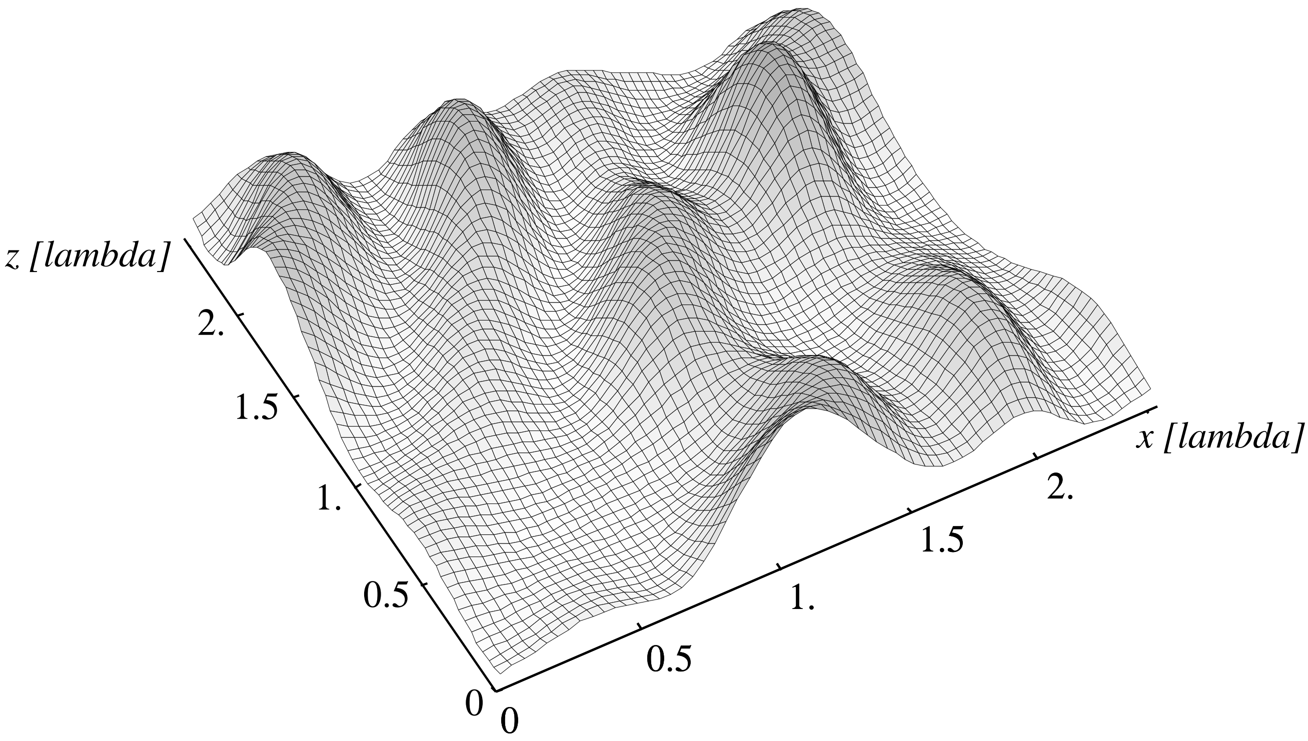

Figure 16.1: Simulation numérique d'un potentiel dipolaire aléatoire dans le demi-espace au-dessus d'une surface rugueuse.
Le potentiel (en unités arbitraires) est calculé en deux dimensions (x, z). La figure correspond à une distance de la surface de $z \simeq 8\,\lambda_L$. La résolution du maillage spatial est $\delta x = \delta z \simeq 0.04\,\lambda_L$. Les modules au carré des coefficients de FOURIER *du champ diffusé, $|E(k_x)|^2$, forment une lorentzienne $\propto 1/[\Lambda^2 + (k_x - q)^2]$ centrée à $q_x = 1.4\,k_L$ avec une largeur $\Lambda = 0.05\,k_L$.*

un grand angle solide.[2] Ceci exprime le fait que le potentiel dipolaire aléatoire est créé par une distribution continue d'ondes planes dont les vecteurs d'ondes sont limités par k_L. Pour la fonction de corrélation d'un champ électrique $E^{(1)}(\mathbf{r})$ incohérent et statistiquement isotrope, ce résultat a été démontré par H. M. NUSSENZVEIG et ses collègues et, plus tard, par F. GORI [159, 160].

Sur la figure 16.1, nous montrons une réalisation particulière du potentiel dipolaire aléatoire. Nous l'avons obtenu par une simulation numérique du champ lumineux diffusé en deux dimensions (x, z). La figure confirme que l'échelle caractéristique de variation du potentiel dipolaire aléatoire est la longueur d'onde optique. En outre, l'amplitude des fluctuations du potentiel est de l'ordre de sa valeur moyenne.

[2]Dans notre modèle, la source est supposée infinie parce que nous considérons la réflexion totale d'une onde plane lumineuse par la surface rugueuse. Dans cette limite, la longueur de corrélation est donnée par (16.5) dans tout le demi-espace au-dessus du diélectrique.

Comme le potentiel dipolaire aléatoire est faible, l'atome est beaucoup trop rapide pour être canalisé dans les vallées de potentiel que l'on voit sur la figure 16.1. Nous devons plutôt nous imaginer son mouvement comme celui d'une bille qui se déplace rapidement sur un «terrain rugueux» : l'atome suivra donc une trajectoire approximativement rectiligne, mais il en est de temps en temps dévié à cause de la rugosité du terrain. L'effet moyen du potentiel aléatoire est donc un élargissement de la distribution de vitesse atomique dans les directions perpendiculaires à la vitesse incidente.

16.2 Formulation du problème

De façon formelle, le problème du mouvement de l'atome dans le potentiel dipolaire aléatoire se pose de la façon suivante :

- Soient données, à une hauteur $z = h$ au-dessus de la surface, la fonction d'onde $\psi(\mathbf{R}, h)$ ainsi que sa dérivée $\nabla\psi(\mathbf{R}, h)$. En imposant ces conditions aux limites,
- nous cherchons la solution à l'équation de SCHRÖDINGER stationnaire

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + [U(z) + V^{(2)}(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = E\,\psi(\mathbf{r}), \tag{16.6}$$

  où $U(z)$ est un potentiel déterminé (le champ de pesanteur, par exemple), et E l'énergie incidente.
- La solution $\psi(\mathbf{r})$ de (16.6) dépend du potentiel aléatoire $V^{(2)}(\mathbf{r})$, et nous devons moyenner sur l'ensemble statistique pour ce potentiel. Cette moyenne permet de calculer la fonction de cohérence

$$\Gamma(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \langle\psi^*(\mathbf{R}_1, z_f)\,\psi(\mathbf{R}_2, z_f)\rangle \tag{16.7}$$

  à une hauteur $z = z_f$ juste au-dessus de la surface, avant que l'atome n'entre dans l'onde évanescente. Dans la suite de ce chapitre, nous prendrons z_f comme origine de l'axe Oz : $z_f = 0$.

Comment la formulation de ce problème se modifie-t-elle si à la hauteur initiale $z = h$, l'atome n'est pas décrit par une fonction d'onde (un «état pur»), mais par une matrice densité ? Notons d'abord que cette matrice densité $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ n'est rien d'autre que la fonction de cohérence initiale des atomes. Il faut donc formuler une équation de propagation pour la fonction de cohérence dans le potentiel aléatoire. En optique lumineuse, une telle approche a été développée par E. WOLF [54, 142], et sa transposition aux ondes de matière a déjà été étudiée par le groupe de P. MEYSTRE [161]. En pensant plutôt aux approches statistique de l'optique quantique, l'on pourrait aussi essayer de modéliser l'évolution de la fonction de cohérence par une équation pilote[3],

[3]C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc et G. GRYNBERG, *Processus d'interaction entre photons et atomes*, (InterEditions, Paris, 1988), chap. IV.

moyennant certaines hypothèses sur les propriétés statistiques du potentiel aléatoire. Les détails d'une telle théorie dépassent cependant le cadre du présent mémoire. Notons seulement que la formulation présentée ici peut être utilisée si la matrice densité initiale correspond à un mélange statistique d'ondes planes[4] : pour chaque vecteur d'onde incident, l'on peut alors faire le calcul de la fonction de cohérence (16.7) pour une onde plane incidente ; et à la fin, il faut moyenner les résultats sur la distribution des vecteurs d'onde atomiques incidents.

16.3 Propagation dans le potentiel dipolaire aléatoire

16.3.1 Un point de vue semi-classique

Dans ce paragraphe, nous nous servons de l'approximation du réseau de phase mince pour déterminer de façon qualitative la probabilité de diffusion de l'atome dans le potentiel dipolaire aléatoire, ainsi que la largeur de sa distribution de vitesse transverse. Pour simplifier le problème, nous nous plaçons en incidence normale.

Rappelons que dans l'approximation du réseau de phase mince, la déformation du front d'onde atomique $\delta\varphi(\mathbf{R})$ par rapport à une onde plane est donnée par

$$\delta\varphi(\mathbf{R}) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\, V^{(2)}[\mathbf{r}(t')], \tag{16.8}$$

où en absence d'un potentiel plan $U(z)$, $\mathbf{r}(t')$ est une trajectoire rectiligne non perturbée avec $\mathbf{r}(0) = (\mathbf{R}, h)$ et $\mathbf{r}(t) = (\mathbf{R}, 0)$. La déformation du front d'onde atomique est caractérisée par la fonction de corrélation du déphasage (16.8) :

$$\langle \delta\varphi(\mathbf{R}_1)\, \delta\varphi(\mathbf{R}_2)\rangle = \frac{1}{\hbar^2 v_z^2}\int_0^h \mathrm{d}z'\,\mathrm{d}z''\, \langle V^{(2)}(\mathbf{R}_1, z')\, V^{(2)}(\mathbf{R}_2, z'')\rangle, \tag{16.9}$$

où nous avons supposé que l'atome traverse le potentiel aléatoire avec une vitesse verticale v_z constante. La double intégrale dans (16.9) fait intervenir la fonction de corrélation du potentiel aléatoire que nous supposons invariante par translation pour simplifier. La valeur de l'intégrale est alors de l'ordre de

$$\int_0^h \mathrm{d}z'\,\mathrm{d}z''\, \langle V^{(2)}(\mathbf{R}_1, z')\, V^{(2)}(\mathbf{R}_2, z'')\rangle \simeq h^2\eta^2 V_{\max}^2 + \ell_c h\, C_{V^{(2)}}(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1, 0), \tag{16.10}$$

où le premier terme, proportionnel au carré h^2 de la longueur d'interaction, provient de la valeur moyenne non nulle du potentiel aléatoire ; comme le potentiel est constant en

[4]Dans ce cas, la fonction de cohérence initiale des atomes est invariante par translation.

moyenne, ce terme ne déforme pas le front d'onde atomique. Le deuxième terme caractérise les fluctuations du front d'onde; il provient de la portée finie des corrélations du potentiel aléatoire, qui limite le domaine d'intégration à une bande d'aire $\ell_c \times h$.

Nous notons que dans le référentiel de l'atome, le «temps de corrélation» du potentiel aléatoire vaut $\tau_c = \ell_c / v_z$, et par conséquent, le temps caractéristique pour la déformation du front d'onde atomique est généralement très court devant les échelles de temps caractéristiques pour le mouvement dans le potentiel plan $U(z)$. Ceci justifie *a posteriori* notre hypothèse que l'atome traverse le potentiel aléatoire à vitesse constante.

16.3.2 Evolution sur une distance courte

Nous avons vu au chapitre 15.3 que pour des fluctuations de phase faibles, la probabilité de diffusion w_{diff} est donnée par la valeur quadratique moyenne du déphasage [équation (15.34)]. Nous obtenons celui-ci en prenant $\mathbf{R}_1 = \mathbf{R}_2$ dans le deuxième terme de (16.10)

$$w_{\text{diff}} = \langle [\delta\varphi(\mathbf{R})]^2 \rangle_{\text{fluc}} \simeq \frac{\ell_c h}{\hbar^2 v_z^2} \eta^2 V_{\max}^2, \tag{16.11}$$

où nous avons supposé que les fluctuations du potentiel aléatoire sont du même ordre que sa valeur moyenne. D'autre part, la largeur δK en vecteur d'onde de la distribution transverse des atomes diffusés est égale à l'inverse de leur longueur de cohérence ℓ_{coh}. Les résultats (16.5) et (16.10) montrent que ℓ_{coh} est donné par la longueur de corrélation du potentiel dipolaire aléatoire, donc de l'ordre de la longueur d'onde optique. La largeur δK est alors de l'ordre du vecteur d'onde optique.

La probabilité de diffusion est donc proportionnelle au carré de l'intensité lumineuse diffusée, $w_{\text{diff}} \propto (\eta V_{\max})^2$, à la différence de celle pour le potentiel dipolaire rugueux $V^{(1)}(\mathbf{r})$, dont la probabilité augmente proportionnellement à $\eta V_{\max}$ [voir (15.32)]. En outre, la probabilité de diffusion dans le champ lointain w_{diff} (16.11) augmente linéairement avec la longueur d'interaction h. Nous interprétons ceci comme un amortissement de l'intensité atomique spéculaire lorsque l'atome traverse le potentiel dipolaire aléatoire : l'intensité spéculaire varie en effet comme $\exp(-w_{\text{diff}})$ [voir (14.29)]. Nous pouvons donc définir une longueur d'interaction caractéristique h_{crit} à partir de laquelle la probabilité de diffusion $w_{\text{diff}} = h/h_{\text{crit}}$ est de l'ordre de l'unité :

$$h_{\text{crit}} \simeq \frac{\hbar^2 v_z^2}{\ell_c \eta^2 V_{\max}^2}. \tag{16.12}$$

Afin de donner une estimation plus explicite de h_{crit}, fixons la vitesse v_z des atomes. En utilisant la condition de réflexion pour le miroir à atomes, $V_{\max} \gtrsim \frac{1}{2} M v_z^2$, et l'estimation $\eta \simeq (2\pi\overline{\sigma}/\lambda_L)^2$ pour la fraction de lumière diffusée, nous trouvons

$$h_{\text{crit}} \lesssim \frac{\lambda_L}{2\pi} \left(\frac{\lambda_L^2}{(\pi\overline{\sigma})^2} \frac{v_{\text{rec}}}{v_z} \right)^2. \tag{16.13}$$

Pour une surface de qualité optique, cette limite pour la longueur d'interaction critique est généralement beaucoup plus grande que la longueur d'onde optique.[5] Dans l'expérience, il est néanmoins possible que le trajet des atomes dans le champ lointain dépasse $h_{\rm crit}$. Avant que les atomes n'entrent dans l'onde évanescente, la composante spéculaire de leur distribution de vitesse est alors détruite et la distribution élargie à la vitesse de recul, à cause de la traversée de la lumière diffusée dans le champ lointain.

16.3.3 Evolution à longue distance

Dans la limite d'une longueur d'interaction grande devant $h_{\rm crit}$, la distribution transverse des vecteurs d'onde atomiques devient complètement diffuse, avec une largeur $\delta K_{\rm diff}$ donnée par l'estimation (15.35). L'on trouve

$$h \gg h_{\rm crit} \;: \qquad \delta K_{\rm diff} \simeq \sqrt{w_{\rm diff}}\, \delta K = \sqrt{\frac{h}{h_{\rm crit}}} k_L, \tag{16.14}$$

et nous constatons que la distribution transverse des atomes s'élargit proportionnelle à $\sqrt{h} = \sqrt{t/v_z}$, comme dans un mouvement Brownien.

Nous pouvons en effet retrouver ce résultat dans un point de vue classique. Représentons-nous les atomes soumis à une force aléatoire F pendant qu'ils traversent le champ lumineux diffusé. La quantité de mouvement transverse δP augmente alors selon

$$\delta P^2 \simeq 2 D_p t, \tag{16.15}$$

où le *coefficient de diffusion* est de l'ordre de $D_p \simeq \langle F^2 \rangle \tau_c$, où $\tau_c \simeq \ell_c / v_z$ est le temps de corrélation de la force aléatoire. Avec l'estimation $\langle F^2 \rangle^{1/2} \simeq k_L \eta V_{\rm max}$ pour l'amplitude de la force aléatoire, nous trouvons

$$\delta K \simeq \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2 \ell_c h}{v_z^2}} k_L \eta V_{\rm max}, \tag{16.16}$$

ce qui est du même ordre que l'expression semi-classique (16.14), compte tenu de (16.12).

Conclusion

Le potentiel dipolaire de la lumière diffusée dans le demi-espace au-dessus du diélectrique conduit à un mouvement diffusif de l'atome. D'un point de vue ondulatoire, ceci pose le problème de déterminer l'évolution de la fonction de cohérence atomique dans un potentiel aléatoire. Ce potentiel est constant en moyenne et présente une longueur de corrélation de l'ordre de la longueur d'onde optique. A l'aide de

[5] Par exemple, (16.13) donne $h_{\rm crit} \lesssim 10^5\, \lambda_L / 2\pi$ pour $\overline{\sigma} = 10^{-2}\, \lambda_L / 2\pi$ et $v_z = 100\, v_{\rm rec}$.

l'approximation du réseau de phase mince, nous avons estimé la probabilité de diffusion $w_{\text{diff}} = h/h_{\text{crit}}$ pour une épaisseur h du potentiel dipolaire aléatoire. La longueur d'interaction caractéristique h_{crit} dépend de l'intensité de la lumière diffusé ainsi que de l'énergie cinétique des atomes. Si l'«épaisseur» du potentiel dipolaire aléatoire est inférieure à h_{crit}, le front d'onde atomique s'en trouve peu déformé, et les atomes auront alors une distribution transverse de vecteurs d'onde avec une forte composante spéculaire, avec une partie diffuse de largeur k_L. Pour une longueur d'interaction plus grande que h_{crit}, la composante diffuse commence à dominer la distribution ; sa largeur peut alors être interprétée par un mouvement Brownien dans le plan transverse.

Nous nous sommes limité dans ce chapitre à un potentiel dipolaire spatialement uniforme qui serait créé par la diffusion d'une onde lumineuse plane. Puisque dans l'expérience, l'on utilise des faisceaux lumineux avec une taille finie w_L, l'intensité lumineuse diffusée décroîtra en fonction de la distance de la surface et l'épaisseur de la région d'interaction sera limitée. De façon analogue, le temps d'interaction sera réduit pour le cas de l'incidence rasante parce que le jet atomique passe peu de temps dans la région au-dessus de la tâche éclairée par le faisceau lumineux. A des distances de la surface qui sont au plus de l'ordre de w_L, l'échelle de variation spatiale du potentiel dipolaire aléatoire est néanmoins donnée par la longueur d'onde optique, et donc beaucoup plus petite que la taille des faisceaux lumineux. Le modèle présenté ici correspond donc à une description «locale» de la situation physique réelle.

Nous avons également supposé que la densité spectrale de la rugosité est uniforme pour les fréquences spatiales qui contribuent à la diffusion de la lumière vers le haut. Si par contre la densité spectrale présente une forte décroissance dans cette gamme de fréquences, la longueur de corrélation du potentiel dipolaire aléatoire sera plus grande que la longueur d'onde optique. Par conséquent, la force transverse qui s'exerce sur l'atome est plus petite.

Il est possible que d'autres sources pour la lumière diffusée deviennent plus importantes que la diffusion par la surface du diélectrique. Notre groupe a en effet observé expérimentalement que la distribution des vitesses transverse des atomes réfléchis par le miroir devient plus étroite lorsque l'on réduit l'intensité de la lumière «parasite» au-dessus du miroir.[6] Dans un modèle simplifié, l'on peut supposer que le champ lumineux parasite a une distribution angulaire incohérente et isotrope. L'on retrouve alors une longueur de corrélation de l'ordre de la longueur d'onde optique [159, 160], comme dans le modèle étudié ici.

Finalement, étant donné que l'atome se trouve pendant un temps long dans le champ lointain, l'émission spontanée peut entrer en jeu. Cependant, l'on peut séparer cet effet de la diffusion dans le potentiel dipolaire alátoire dans l'expérience parce que la diffusion associée à l'émission spontanée varie différemment en fonction du désaccord à résonance. En outre, l'émission spontanée ne conserve pas l'énergie des atomes de sorte qu'elle conduira également à un élargissement de la composante verticale de la vitesse atomique. Dans l'expérience de notre groupe à Orsay, un tel

[6] G. HORVATH, A. LANDRAGIN, communication privée (1996).

élargissement a pu être exclu avec une résolution en-dessous de la vitesse de recul [66], de sorte que l'émission spontanée ne pouvait être à l'origine de la réflexion diffuse observée.

Chapitre 17

Comparaison des mécanismes et conclusion

La réflexion d'atomes par le miroir à onde évanescente devient diffuse lorsque l'interface vide–diélectrique où l'onde évanescente est créée, présente une rugosité du même ordre que la longueur d'onde atomique incidente. Cette longueur d'onde étant généralement très inférieure à la longueur d'onde optique, l'optique atomique impose un «standard optique» beaucoup plus sévère aux composants utilisés dans les réalisations expérimentales du miroir à atomes. L'interface vide–diélectrique est sujette à des contraintes particulièrement fortes lorsque le miroir fait partie d'un interféromètre atomique.

Les mécanismes d'interaction avec la surface diélectrique

Une raison importante pour la réflexion diffuse d'atomes par le miroir est que le faisceau lumineux qui crée l'onde évanescente par réflexion totale interne, est diffusé par la surface du diélectrique. Le champ diffusé est certes faible en amplitude par rapport au champ évanescent, mais l'interférence des deux champs crée un potentiel dipolaire rugueux avec un contraste suffisamment élevé pour que l'onde atomique soit diffusée de façon efficace. Ce mécanisme donne la contribution la plus importante à la rugusité du miroir dans le champ proche. Dans le champ lointain, l'atome est diffusé par le potentiel dipolaire de la lumière diffusée et parasite, qui présente des tavelures aléatoires. Comme les atomes traversent le champ lointain pendant un temps relativement long, leur distribution de vitesse devient diffuse même si la fraction de lumière diffusée par la surface est faible.

Des observations récentes de notre groupe dans l'expérience du miroir à atomes semblent favoriser la conclusion que la lumière diffusée par la surface rugueuse est effectivement le mécanisme dominant pour la réflexion diffuse des atomes : non seulement la largeur de la distribution de vitesse des atomes réfléchis semble augmenter avec la rugosité de la surface du diélectrique, mais aussi l'on a observé une distribution anisotrope, plus large dans la direction parallèle au vecteur d'onde de l'onde évanescente principale, ce qui est en accord avec la fonction de réponse calculée pour le potentiel dipolaire rugueux. En outre, la contribution de la lumière parasite au-dessus du miroir n'est pas négligeable : la réflexion devient « plus spéculaire » si l'on élimine avec soin les sources de lumière diffusée autres que la surface rugueuse.[1]

D'autres vérifications sont possibles dans l'expérience : l'on peut discriminer les contributions de la lumière diffusée dans les champs proche et lointain parce qu'elles ont des comportements différents en fonction de l'intensité $\eta V_{\rm max}$ de la lumière diffusée. A l'ordre le plus bas en perturbations, la lumière diffusée dans le champ proche donne une probabilité de réflexion diffuse à peu près proportionnelle à l'intensité diffusée, $w_{\rm diff} \propto \eta V_{\rm max}$ [voir (15.32)], alors que la diffusion d'atomes dans le champ lointain augmente avec le carré de l'intensité diffusée, $w_{\rm diff} \propto (\eta V_{\rm max})^2$ [voir (16.11)]. Une autre possibilité est de pulser le miroir de façon à ce que les atomes soient « dans le noir » pendant qu'ils s'en approchent. Finalement, une mesure directe de l'intensité lumineuse diffusée par la surface peut être comparée à la théorie que nous avons présentée ; il est notamment possible que la diffusion dans le diélectrique ou par des atomes adsorbés à la surface donne des contributions importantes qui s'ajoutent à la diffusion par la surface rugueuse.

Par rapport à l'interaction avec la lumière diffusée, la modification de l'interaction de VAN DER WAALS à cause de la rugosité de la surface du diélectrique joue un rôle mineur. C'est seulement lorsque l'atome rebrousse chemin au voisinage du sommet de la barrière de potentiel du miroir que sa contribution à la réflexion diffuse devient du même ordre de grandeur que celle de la lumière diffusée dans le champ proche. Expérimentalement, les deux contributions peuvent donc être séparées en faisant varier ou bien l'énergie incidente, ou bien le potentiel lumineux de l'onde évanescente. Cependant, si dans l'expérience, les atomes « arrosent » de façon uniforme la tâche lumineuse où se trouve l'onde évanescente, la distance du point de rebroussement varie à travers le profil d'intensité de la tâche. Au centre de la tâche, la réflexion diffuse est alors dominée par le potentiel dipolaire rugueux, alors qu'à ses bords, le potentiel de VAN DER WAALS rugueux donne une contribution importante. Pour une densité d'atomes incidents uniforme et un profil d'intensité gaussien, l'on peut montrer que l'on mesure alors une moyenne sur les distances d'approches avec une distribution approximativement uniforme entre une valeur maximale au centre et une valeur minimale au bord de la tâche lumineuse.

Finalement, il est complètement négligeable pour la réflexion diffuse que les atomes de la surface du diélectrique effectuent un mouvement thermique. Leurs oscillations sont en effet très rapides à l'échelle du temps caractéristique pour la réflexion par l'onde évanescente, et l'atome n'est donc soumis qu'à un potentiel statique moyenné.

[1] G. HORVATH, A. LANDRAGIN, communication privée (1996).

Représentations physiques pour la réflexion diffuse

Nous avons identifié plusieurs images physiques complémentaires pour la réflexion diffuse. De façon générale, nous avons décrit la rugosité du miroir à atomes par un *potentiel rugueux* qui s'ajoute au potentiel dipolaire de l'onde évanescente pour une surface diélectrique parfaitement plane. Par conséquent, l'énergie de l'atome est conservée lors de la réflexion diffuse. A l'ordre le plus bas, l'onde atomique reçoit des transferts de vecteur d'onde parallèles au plan du miroir qui correspondent aux composantes de FOURIER du potentiel rugueux. En incidence normale, les transferts de vecteur d'onde dans les directions perpendiculaire et parallèle au miroir sont alors très différents : en particulier, la réflexion est quasiment spéculaire dans la direction normale, ce qui est en accord avec les expériences du groupe de J. DALIBARD [14, 85] où la vitesse normale après la réflexion fut mesurée avec une résolution bien en dessous de la vitesse de recul. Dans les directions parallèles au plan par contre, le potentiel rugueux donne lieu à une réflexion diffuse des atomes avec des transferts de l'ordre de quelques vitesses de recul pour le cas du potentiel dipolaire rugueux.

Lorsqu'un potentiel rugueux est présent dans le champ proche du miroir, la réflexion diffuse peut être interprétée comme la *diffraction par un ensemble incohérent de réseaux*. Pour une fréquence spatiale donnée du potentiel rugueux, il s'agit en effet d'un potentiel périodique pour lequel on calcule une probabilité de diffraction. La distribution des atomes diffusés correspond alors à la somme incohérente des figures de diffraction sur le spectre de FOURIER du potentiel rugueux. Nous avons en effet constaté qu'elle s'écrit comme le produit de la densité spectrale de rugosité de la surface et d'une fonction de réponse atomique. Cette fonction de réponse détermine la plage de fréquences spatiales de la surface qui sont pertinentes pour la diffusion de l'onde atomique (quelques vecteurs d'onde optiques), ainsi que la probabilité totale de réflexion diffuse, qui correspond à l'intégrale de la fonction de réponse sur le spectre de rugosité.

Nous avons montré qu'en incidence normale, une bonne approximation de la distribution des atomes diffusés est obtenue si l'on considère le miroir à onde évanescente comme un *miroir parfait rugueux*. La surface du miroir est donnée par la surface isopotentielle où la valeur du potentiel total du miroir est égale à l'énergie cinétique incidente. La rugosité effective du miroir correspond alors à la rugosité de cette « surface de rebroussement », et la longueur de cohérence des atomes diffusés à sa longueur de corrélation. En incidence oblique, une telle description correspond moins bien à la réalité parce qu'elle néglige l'épaisseur verticale non nulle de l'onde évanescente. Tout comme la diffraction au premier ordre, la réflexion diffuse en incidence oblique est seulement efficace si la composante normale du vecteur d'onde atomique est inchangée, à la constante de décroissance de l'onde évanescente près. Cette coupure limite la largeur de la fonction de réponse atomique dans le plan des fréquences spatiales, et réduit la rugosité effective du miroir.

La limite pour le transfert de vecteur d'onde normal n'est cependant pas pertinente pour la réflexion diffuse d'un *atome avec plusieurs sous-niveaux magnétiques* en incidence oblique. Un processus élémentaire de diffusion correspond alors à une transition RAMAN stimulée où l'atome absorbe un photon de l'onde évanescente principale et en émet un autre dans un mode du champ diffusé. Puisque le champ diffusé contient d'autres composantes de polarisation, l'atome peut alors changer de sous-niveau. La différence entre les déplacements lumineux des sous-niveaux est convertie en un transfert d'énergie cinétique dans la direction normale. Nous avons appelé ce mécanisme un «effet Sisyphe stimulé», par analogie au refroidissement radiatif [28, 29]. Le principe de FRANCK–CONDON favorise certaines valeurs de l'énergie cinétique verticale finale pour lesquelles coïncident les points de rebroussement classiques dans les courbes de potentiel initiale et finale.

Finalement, l'interaction de l'atome avec le champ lointain de la lumière diffusée peut être modélisée par un *mouvement dans un potentiel aléatoire*. D'un point de vue classique, la distribution des vitesses transverses des atomes s'élargit de façon diffusive aux temps d'interaction longs. Une telle approche classique semble justifiée parce que l'échelle caractéristique du potentiel dipolaire du champ lointain est donnée par la longueur d'onde optique, alors que la longueur d'onde atomique est beaucoup plus petite. Ce modèle classique pourra encore servir pour caractériser la spécularité d'un miroir magnétique, par exemple, parce que le champ magnétique varie généralement sur une échelle spatiale plus grande encore que la longueur d'onde optique.

Analyse de surfaces par réflexion diffuse d'atomes

La grande sensibilité de la réflexion diffuse d'atomes au profil de la surface du diélectrique permet d'envisager que ce phénomène puisse servir d'outil d'analyse de la rugosité. Dans la direction verticale, la résolution est en effet donnée par la longueur d'onde de DE BROGLIE des atomes incidents. Parallèlement à la surface, la sensibilité de la réflexion diffuse est donnée par la fonction de réponse atomique : des fréquences spatiales jusqu'à quelques vecteurs d'onde optiques peuvent être résolues. La réponse atomique présente cependant des variations assez fortes, en particulier sont privilégiées les fréquences spatiales qui excitent des ondes planes homogènes dans le champ lumineux diffusé. La forme précise de la fonction de réponse atomique dépend en outre de la distance du point de rebroussement des atomes. Ces propriétés de la réflexion diffuse la rendent un outil d'analyse comparable à la microscopie optique en champ proche (*scanning near-field optical microscopy, «SNOM»*) [62, 63, 64, 65]. Par exemple, la distribution angulaire moyenne des atomes diffusés donne une information équivalente à la fonction de corrélation de l'intensité lumineuse au-dessus d'un surface rugueuse [162], les deux quantités étant reliées par une transformation de FOURIER. Par rapport à la microscopie en champ proche, la réflexion diffuse d'atomes fournit donc une caractérisation *globale* plutôt que locale. Un avantage des atomes est qu'ils sont une perturbation négligeable pour le champ proche. En outre, leur interaction avec la polarisation du champ lumineux est relativement simple ; la réflexion diffuse d'atomes à sous-niveaux magnétiques, amplifiée par effet FRANCK–CONDON, permet par exemple d'étudier la polarisation d'un champ lumineux évanescent — qui a d'une part des propriétés particulières en comparant à une onde plane homogène, et à laquelle l'on a d'autre part difficilement accès par la microscopie en champ proche.

Par rapport à la réflexion diffuse par l'onde évanescente rugueuse, la diffusion d'un jet thermique d'atomes par une surface «nue» (sans onde évanescente) couvre une plage de fréquences spectrales complémentaire : les plus petites structures resolues par cette technique sont en fait de l'ordre de l'Ångström plutot que d'une fraction de la longueur d'onde optique. Dans ce contexte, l'on observe aussi que les atomes sont diffusés par la rugosité statique de la surface, en respectant la conservation de l'énergie. Ce signal est appelé une «diffusion quasi-élastique» [150, 6], par opposition à la diffusion par des excitations de la surface qui dépendent du temps et qui changent l'énergie des atomes.

Situation des approches théoriques

Nous pouvons qualifier l'approche théorique que nous avons suivie pour décrire la réflexion diffuse des atomes, d'«optique atomique statistique», qui forme un parallèle aux approches statistiques de l'optique lumineuse. La fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$ apparaît ici avec le même statut que le champ électrique classique $E(\mathbf{r})$. Les fonctions de cohérence que l'on calcule dans les deux théories sont par ailleurs des valeurs moyennes par rapport à un ensemble statistique classique, elles ne sont pas à confondre avec les moyennes quantiques qui apparaissent lorsque le champ est quantifié. Nous pouvons les rapprocher de la matrice densité externe $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ qui est utilisée dans le domaine du refroissement radiatif [30, 88]. L'élément aléatoire de cette théorie-là provient du fait que l'on n'observe pas les photons émis spontanément et qu'il faut «tracer» sur les fluctuations quantiques du champ électro-magnétique ; de façon analogue, nous admettons ici notre ignorance de la forme détaillée de la surface rugueuse, en nous restreignant à des valeurs moyennes pour caractériser la réflexion diffuse d'atomes.

A la différence du refroidissement radiatif par contre, la cohérence des ondes atomiques n'est pas détruite en fonction du temps dans notre problème. L'on peut alors se demander si le mouvement diffusif dans le champ lointain sera modifié aux temps longs à cause du caractère ondulatoire des atomes. Nous nous sommes en effet servi pour ce sujet de l'approximation du réseau de phase mince, où le mouvement n'est décrit que d'une façon approchée. Dans la diffraction par une onde stationnaire, par exemple, l'on a cependant constaté que l'approximation du réseau de phase mince (ou de Raman–Nath) décrit correctement la distribution de vitesse des atomes seulement pour un temps limité, au-delà duquel elle garde une largeur fixe, avec des populations qui oscillent [49, 51]. Dans un potentiel aléatoire, il serait alors intéressant d'étudier si les ondes de matière peuvent se localiser.

Finalement, nous nous sommes limité ici au calcul des fonctions de cohérence du deuxième ordre, $\langle\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}')\rangle$, qui correspondent aux valeurs moyennes pour des mesures de l'intensité atomique. Si par contre, l'on mesure plutôt une fonction de corrélation de l'intensité, comme l'a suggeré le groupe de KAZANTSEV [163, 137], il faut calculer des fonctions de cohérence d'ordre quatrième

$$\langle \psi^*(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2)\psi^*(\mathbf{r}_3)\psi(\mathbf{r}_4)\rangle.$$

C'est pour ce genre de fonctions de cohérence que la (« deuxième ») quantification du champ atomique (en bosons ou fermions) entre en jeu [161]. Il est alors possible d'analyser la réflexion d'un ensemble atomique condensé, par exemple, en termes de « tavelures atomiques ».

Publications de l'auteur

Articles

C. Henkel, J.-Y. Courtois, R. Kaiser, C. I. Westbrook et A. Aspect, "Phase Shifts of Atomic de Broglie Waves at an Evanescent Wave Mirror", *Laser Physics* **4**, 1042 (1994).

C. Henkel, A. M. Steane, R. Kaiser et J. Dalibard, "A modulated mirror for atomic interferometry", *J. Phys. II (France)* **4**, 1877 (1994).

C. Henkel, J.-Y. Courtois et A. Aspect, "Atomic Diffraction by a Thin Phase Grating", *J. Phys. II (France)* **4**, 1955 (1994).

C. Henkel, C. I. Westbrook et A. Aspect, "Quantum reflection: atomic matter wave optics in an attractive exponential potential", *J. Opt. Soc. Am. B* **13**, 233 (1996).

A. Landragin, G. Labeyrie, C. Henkel, R. Kaiser, N. Vansteenkiste, C. I. Westbrook et A. Aspect, "Specular versus diffuse reflection of atoms from an evanescent wave mirror", *Opt. Lett.* **21**, 1581 (1996).

C. Henkel, K. Mølmer, R. Kaiser, N. Vansteenkiste, C. I. Westbrook et A. Aspect, "Diffuse atomic reflection at a rough mirror", *Phys. Rev. A* **55**, 1160 (1997).

C. Henkel, K. Mølmer, R. Kaiser et C. I. Westbrook, "Atomic diffraction assisted by a stimulated Sisyphus mechanism", *Phys. Rev. A* 56, R9 (1997).

Communications publiées

C. Henkel, J.-Y. Courtois et A. Aspect, "Atomoptik in der Phasengitternäherung — Beugung von Atomstrahlen an stehenden Wellen". Exposé lors de la *Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, Hamburg (Allemagne) mars 1994. Publié aux *Verhandl. DPG (VI)* **29**, 684 (1994).

C. Henkel, A. Aspect, J.-Y. Courtois, R. Kaiser, K. Mølmer et C. I. Westbrook, "Perte de cohérence dans la réflexion d'atomes sur une onde évanescente". Communication par affiche lors du *Quatrième Colloque sur les Lasers et l'Optique Quantique*, Palaiseau, novembre 1995. Publiée aux *Ann. Phys. Fr.* **20**, 643 (1995).

C. Henkel, A. Aspect, J.-Y. Courtois, R. Kaiser, G. Labeyrie, A. Landragin, K. Mølmer, N. Vansteenkiste et C. I. Westbrook, "Diffuse reflection of atoms at an evanescent wave mirror". Exposé lors de la *Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, Jena (Allemagne) mars 1996. Publié aux *Verhandl. DPG (VI)* **31**, 286 (1996).

Bibliographie

[1] R. J. Cook et R. K. Hill, "An electromagnetic mirror for neutral atoms", *Opt. Commun.* **43**, 258 (1982).

[2] J. J. McClelland, R. E. Scholten, E. C. Palm et R. J. Celotta, "Laser focused atomic deposition", *Science* **262**, 877 (1993).

[3] G. Timp, R. E. Behringer, D. M. Tennant, J. E. Cunningham, M. Prentiss et K. K. Berggren, "Using light as a lens for submicron, neutral-atom lithography", *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1636 (1992).

[4] R. Gupta, J. J. McClelland, R. J. Celotta et P. Marte, "Raman induced avoided crossings in adiabatic optical potentials: observation of $\lambda/8$ spatial frequency in the distribution of atoms", *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4689 (1996).

[5] S. Nowak, T. Pfau et J. Mlynek, "Nanolithography with Metastable Helium", *Appl. Phys. B* **63**, 203 (1996).

[6] A. Lahee et P. Toennies, "Surface studies on the rebound", *Physics World*, avril 1993, p. 61.

[7] M. S. Hammond, F. B. Dunning, G. K. Walters et G. A. Prinz, "Spin dependence in He(2^3S) metastable-atom deexcitation at magnetized Fe(110) and O/Fe(110) surfaces", *Phys. Rev. B* **45**, 3674 (1992).

[8] Ch. J. Bordé, "Atomic interferometry with internal state labelling", *Phys. Lett. A* **140**, 10 (1989) (ce papier a initié le domaine de l'interférométrie atomique) ; M. Kasevich et S. Chu, "Measurement of the gravitational acceleration of an atom with a light-pulse atom interferometer", *Appl. Phys. B* **54**, 321 (1992).

[9] F. Riehle, Th. Kisters, A. Witte, J. Helmcke et Ch. J. Bordé, "Optical Ramsey spectroscopy in a rotating frame: Sagnac effet in a matter-wave interferometer", *Phys. Rev. Lett.* **67**, 177 (1991); J. Schmiedmayer *et al.*, "Optics and interferometry with atoms and molecules", in "Atom Interferometry", *Advances in Atomic and Molecular Physics*, supplément 3, édité par P. R. Berman (1997), à paraître; T. L. Gustavson, P. Bouyer et M. Kasevich, "Precision rotation measurements with an atom interferometer gyroscope", *Phys. Rev. Lett.* (1997), à paraître.

[10] J. V. Hajnal et G. I. Opat, “Diffraction of atoms by a standing evanescent light wave – a reflection grating for atoms”, *Opt. Commun.* **71**, 119 (1989).

[11] G. I. Opat, S. J. Wark et A. Cimmino, “Electric and Magnetic Mirrors and Gratings for Slowly Moving Neutral Atoms and Molecules”, *Appl. Phys. B* **54**, 396 (1992).

[12] M. Christ, A. Scholz, M. Schiffer, R. Deutschmann et W. Ertmer, “Diffraction and reflection of a slow metastable neon beam by an evanescent light grating”, *Opt. Commun.* **107**, 211 (1994).

[13] R. Brouri, R. Asimov, M. Gorlicki, S. Feron, J. Reinhardt, V. Lorent et H. Haberland, “Thermal atomic beam splitting by an evanescent standing wave”, *Opt. Commun.* **124**, 448 (1996).

[14] A. Steane, P. Szriftgiser, P. Desbiolles et J. Dalibard, “Phase modulation of atomic de Broglie waves”, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4972 (1995).

[15] V. I. Balykin, V. S. Letokhov, Y. B. Ovchinnikov et A. I. Sidorov, “Reflection of an atomic beam from a gradient of an optical field”, *JETP Lett.* **45**, 353 (1987).

[16] V. I. Balykin, V. S. Letokhov, Y. B. Ovchinnikov et A. I. Sidorov, “Quantum-state–selective mirror reflection of atoms by laser light”, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2137 (1988).

[17] T. Esslinger, M. Weidemüller, A. Hemmerich et T. W. Hänsch, “Surface-plasmon mirror for atoms”, *Opt. Lett.* **18**, 450 (1993).

[18] S. Feron *et al.*, “Reflection of metastable neon atoms by a surface plasmon wave”, *Opt. Commun.* **102**, 83 (1993).

[19] W. Seifert, C. S. Adams, V. I. Balykin, C. Heine, Y. Ovchinnikov et J. Mlynek, “Reflection of metastable argon atoms from an evanescent wave”, *Phys. Rev. A* **49**, 3814 (1994).

[20] W. Seifert, R. Kaiser, A. Aspect et J. Mlynek, “Reflection of Atoms from a Dielectric Waveguide”, *Opt. Commun.* **111**, 566 (1994).

[21] M. Drewsen, P. Laurent, A. Nadir, G. Santarelli, A. Clairon, Y. Castin, D. Grison et C. Salomon, “Investigation of sub-Doppler cooling effects in a cesium magneto-optical trap”, *Appl. Phys. B* **59**, 283 (1994).

[22] M. A. Kasevich, D. S. Weiss et S. Chu, “Normal-incidence reflection of slow atoms from an optical evanescent wave”, *Opt. Lett.* **15**, 607 (1990).

[23] C. G. Aminoff, A. M. Steane, P. Bouyer, P. Desbiolles, J. Dalibard et C. Cohen-Tannoudji, “Cesium atoms bouncing in a stable gravitational cavity”, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3083 (1993).

[24] T. M. Roach, H. Abele, M. G. Boshier, H. L. Grossman, K. P. Zetie et E. A. Hinds, "Realization of a Magnetic Mirror for Cold Atoms", *Phys. Rev. Lett.* **75**, 629 (1995).

[25] A. I. Sidorov, R. J. McLean, W. J. Rowlands, D. C. Lau, J. E. Murphy, M. Walkiewicz, G. I. Opat et P. Hannaford, "Specular reflection of cold caesium atoms from a magnetostatic mirror", *Quantum and Semiclassical Optics* **8**, 713 (1996).

[26] T. W. Hänsch et A. L. Schawlow, "Cooling of gases by laser radiation", *Opt. Commun.* **13**, 68 (1975).

[27] J. P. Gordon et A. Ashkin, "Motion of Atoms in a Radiation Trap", *Phys. Rev. A* **21**, 1606 (1980).

[28] J. Dalibard et C. Cohen-Tannoudji, "Dressed-atom approach to atomic motion in laser light: the dipole force revisited", *J. Opt. Soc. Am. B* **2**, 1707 (1985).

[29] J. Dalibard et C. Cohen-Tannoudji, "Laser cooling below the Doppler limit by polarization gradients: simple theoretical models", *J. Opt. Soc. Am. B* **6**, 2023 (1989).

[30] A. Aspect, E. Arimondo, R. Kaiser, N. Vansteenkiste et C. Cohen-Tannoudji, "Laser cooling below the one-photon recoil energy by velocity-selective coherent population trapping: theoretical analysis", *J. Opt. Soc. Am. B* **6**, 2112 (1989).

[31] Y. Shevy, D. S. Weiss, P. J. Ungar et S. Chu, "Bimodal speed distribution in laser-cooled atoms", *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1118 (1989).

[32] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman et E. A. Cornell, "Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor", *Science* **269**, 198 (1995).

[33] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett et R. G. Hulet, "Evidence of Bose–Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions", *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995).

[34] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn et W. Ketterle, "Bose–Einstein condensation in a gas of sodium atoms", *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).

[35] M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. M. Kurn, D. S. Durfee et W. Ketterle, "Bose–Einstein-Condensation in a Tightly Confining dc Magnetic Trap", *Phys. Rev. Lett.* **77**, 416 (1996).

[36] J. E. Lennard-Jones, *Trans. Faraday Soc.* **28**, 333 (1932).

[37] M. J. Mehl et W. L. Schaich, “The van der Waals interaction between an atom and a solid”, *Surf. Sci.* **99**, 553 (1980).

[38] S. Haroche, in *Fundamental Systems in Quantum Optics (Les Houches, Session LIII)*, édité par J. Dalibard, J.-M. Raimond et J. Zinn-Justin (North-Holland, Amsterdam, 1992), pp. 767–940.

[39] A. Landragin, J.-Y. Courtois, G. Labeyrie, N. Vansteenkiste, C. I. Westbrook et A. Aspect, “Measurement of the van der Waals force in an atomic mirror”, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1464 (1996).

[40] C. Tanguy, S. Reynaud et C. Cohen-Tannoudji, “Deflection of an atomic beam by a laser wave: transition between diffractive and diffusive regimes”, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17**, 4623 (1984).

[41] C. Cohen-Tannoudji, F. Bardou et A. Aspect, in *Tenth International Conference on Laser Spectroscopy*, édité par M. Ducloy, E. Giacobini et G. Camy (World Scientific, Singapore, 1992), pp. 3–14.

[42] R. J. Cook et A. F. Bernhardt, “Deflection of atoms by a resonant standing electromagnetic wave”, *Phys. Rev. A* **18**, 2533 (1978).

[43] S. Stenholm et J. Javanainen, “Velocity Redistribution by Standing Waves”, *Appl. Phys.* **16**, 159 (1978).

[44] A. P. Kazantsev, G. I. Surdovitch et V. P. Yakovlev, “On the quantum theory of resonance scattering of atoms by light”, *JETP Lett.* **31**, 509 (1980).

[45] A. F. Bernhardt et B. W. Shore, “Coherent atomic deflection by resonant standing waves”, *Phys. Rev. A* **23**, 1290 (1981).

[46] D. E. Pritchard et P. L. Gould, “Experimental possibilities for observation of unidirectional momentum transfer to atoms from standing-wave light”, *J. Opt. Soc. Am. B* **2**, 1799 (1985).

[47] P. J. Martin, B. G. Oldaker, A. H. Miklich et D. E. Pritchard, “Bragg Scattering of Atoms from a Standing Light Wave”, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 515 (1988).

[48] M. Wilkens, E. Schumacher et P. Meystre, “Band theory of a common model of atom optics”, *Phys. Rev. A* **44**, 3130 (1991).

[49] E. Schumacher, M. Wilkens, P. Meystre et S. Glasgow, “Spontaneous emission in the near-resonant Kapitza-Dirac effect”, *Appl. Phys. B* **54**, 451 (1992).

[50] W. Zhang et D. F. Walls, “Quantum field theory of interaction of ultracold atoms with a light wave: Bragg scattering in nonlinear atom optics”, *Phys. Rev. A* **49**, 3799 (1994).

[51] U. Janicke et M. Wilkens, "Atomic motion in a magneto-optical field", *Phys. Rev. A* **50**, 3265 (1994).

[52] S. Bernet, M. Oberthaler, R. Abfalterer, J. Schmiedmayer et A. Zeilinger, "Modulation of atomic de Broglie waves using Bragg diffraction", *Quantum Semiclass. Opt.* **8**, 497 (1996).

[53] S. Dürr, S. Kunze et G. Rempe, "Pendellösung oscillations in second-order Bragg scattering of atoms from a standing light wave", *Quantum Semiclass. Opt.* **8**, 531 (1996).

[54] M. Born et E. Wolf, *Principles of Optics* (Pergamon Press, London, 1959).

[55] H. Hoinkes, "The physical interaction potential of gas atoms with single-crystal surfaces, determined from gas-surface diffraction experiments", *Rev. Mod. Phys.* **52**, 933 (1980).

[56] A. F. Devonshire, "The Interaction of Atoms and Molecules with Solid Surfaces. V—The Diffraction and Reflexion of Molecular Rays", *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A* **156**, 37 (1936).

[57] J. E. Lennard-Jones et A. F. Devonshire, "The Interaction of Atoms and Molecules with Solid Surfaces. VII—The Diffraction of Atoms by a Surface", *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A* **158**, 253 (1937).

[58] N. Cabrera, V. Celli, F. O. Goodman et R. Manson, "Scattering of Atoms by Solid Surfaces. I", *Surf. Sci.* **19**, 67 (1970).

[59] J. Eastman et P. Baumeister, "The microstructure of polished optical surfaces", *Opt. Commun.* **12**, 418 (1974).

[60] P. Croce et L. Prod'homme, "Sur les conditions d'application de la diffusion optique à la caractérisation des surfaces rugueuses", *J. Optics (Paris)* **15**, 95 (1984).

[61] P. Roche et E. Pelletier, "Characterizations of optical surfaces by measurement of scattering distribution", *Appl. Opt.* **23**, 3561 (1984).

[62] J. Cites, M. F. M. Sanghadasa, C. C. Sung, R. C. Reddick, R. J. Warmack et T. L. Ferrell, "Analysis of photon scanning tunneling microscope images", *J. Appl. Phys.* **71**, 7 (1992).

[63] D. Courjon, C. Bainier et F. Baida, "Seeing inside a Fabry–Pérot resonator by means of a scanning tunneling optical microscope", *Opt. Commun.* **110**, 7 (1994).

[64] J. Mertz, M. Hipp, J. Mlynek et O. Marti, “Optical near-field imaging with a semiconductor probe tip”, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 2338 (1994).

[65] F. D. Fornel, P. M. Adam, L. Salomon, J. P. Goudonnet, A. Sentenac, R. Carminati et J.-J. Greffet, “Analysis of image formation with a photon scanning tunneling microscope”, *J. Opt. Soc. Am. A* **13**, 35 (1996).

[66] A. Landragin, G. Labeyrie, C. Henkel, R. Kaiser, N. Vansteenkiste, C. I. Westbrook et A. Aspect, “Specular versus diffuse reflection of atoms from an evanescent-wave mirror”, *Opt. Lett.* **21**, 1581 (1996).

[67] A. Messiah, *Mécanique quantique*, nouvelle édition (Dunod, Paris, 1995).

[68] J. M. Jackson et N. F. Mott, “Energy exchange between inert gas atoms and a solid surface”, *Proc. Roy. Soc. (London) Ser. A* **137**, 703 (1932).

[69] R. P. Feynman et A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, New York, 1965).

[70] M. A. Sepúlveda, S. Tomsovic et E. J. Heller, “Semiclassical propagation: how long can it last?”, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 402 (1992).

[71] C. Cohen-Tannoudji, “Interférométrie atomique”, *Cours de Physique Atomique et Moléculaire au Collège de France, Paris* (1993), non publié.

[72] P. Storey et C. Cohen-Tannoudji, “The Feynman integral approach to atomic interferometry. A tutorial.”, *J. Phys. II (France)* **4**, 1999 (1994).

[73] J. L. Beeby, “The scattering of helium atoms from surfaces”, *J. Phys. C: Solid St. Phys.* **4**, L359 (1971).

[74] U. Garibaldi, A. C. Levi, R. Spadacini et G. E. Tommei, “Quantum theory of atom–surface scattering: diffraction and rainbow”, *Surf. Sci.* **48**, 649 (1975).

[75] H.-D. Meyer, “A semiclassical approach to inelastic scattering from solid surfaces and to the Debye–Waller factor”, *Surf. Sci.* **104**, 117 (1981).

[76] R. Brako et D. M. Newns, “Energy and angular distribution of atoms scattered from surfaces”, *Surf. Sci.* **117**, 42 (1982).

[77] T. Brunner et W. Brenig, “Elastic scattering, sticking and accomodation of noble gas atoms at a cold surface”, *Surf. Sci.* **291**, 192 (1993).

[78] R. Deutschmann, W. Ertmer et H. Wallis, “Reflection and diffraction of atomic de Broglie waves by an evanescent laser wave”, *Phys. Rev. A* **47**, 2169 (1993).

[79] R. Deutschmann, W. Ertmer et H. Wallis, “Reflection beam splitter for multilevel atoms”, *Phys. Rev. A* **48**, 4023 (1993).

[80] C. M. Savage, D. Gordon et T. C. Ralph, “Numerical modeling of evanescent wave atom optics”, *Phys. Rev. A* **52**, 4741 (1995).

[81] D. Gordon et C. M. Savage, “Evanescent wave diffraction of multi-level atoms”, *Opt. Commun.* **130**, 34 (1996).

[82] M. Nieto-Vesperinas, *Scattering and Diffraction in Physical Optics* (Wiley & Sons, New York, 1991).

[83] M. V. Berry, “Cusped rainbows and incoherence effects in the rippling-mirror model for particle scattering from surfaces”, *J. Phys. A: Math. Gen.* **8**, 566 (1975).

[84] A. C. Levi et H. Suhl, “Quantum theory of atom–surface scattering: Debye–Waller factor”, *Surf. Sci.* **88**, 221 (1979).

[85] P. Szriftgiser, D. Guéry-Odelin, M. Arndt et J. Dalibard, “Atomic wave diffraction and interference using temporal slits”, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4 (1996).

[86] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc et G. Grynberg, *Photons et atomes — Introduction à l’électrodynamique quantique* (InterEditions, Paris, 1987).

[87] T. Pfau, S. Spälter, C. Kurtsiefer, C. R. Ekstrom et J. Mlynek, “Loss of spatial coherence by a single spontaneous emission”, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1223 (1994).

[88] Y. Castin et J. Dalibard, “Quantization of Atomic Motion in Optical Molasses”, *Europhys. Lett.* **14**, 761 (1991).

[89] M. Berry, in *Les Houches, Session XXXV, 1980*, édité par R. Balian et *al.* (North Holland, 1981), pp. 456–543.

[90] N. Fröman et P. O. Fröman, *JWKB approximations: contributions to the theory* (North-Holland, Amsterdam, 1965).

[91] Y. Castin, Thèse de doctorat, Université de Paris VI, 1992.

[92] J.-Y. Courtois, J.-M. Courty et J. C. Mertz, “Internal Dynamics of Multilevel Atoms Near a Vacuum-Dielectric Interface”, *Phys. Rev. A* **53**, 1862 (1996).

[93] R. Kaiser, Y. Lévy, N. Vansteenkiste, A. Aspect, W. Seifert, D. Leipold et J. Mlynek, “Resonant enhancement of evanescent waves with a thin dielectric waveguide”, *Opt. Commun.* **104**, 234 (1994).

[94] *Handbook of Mathematical Functions*, 9e édition, édité par M. Abramowitz et I. A. Stegun (Dover Publications, Inc., New York, 1972).

[95] A. Clairon, C. Salomon, S. Guellati et W. D. Phillips, “Ramsey resonances in a Zacharias fountain”, *Europhys. Lett.* **16**, 165 (1991).

[96] F. Knauer et O. Stern, "Über die Reflexion von Molekularstrahlen", *Z. Phys.* **53**, 779 (1929).

[97] R. Frisch et O. Stern, *Z. Phys.* **84**, 430 (1933).

[98] J. V. Hajnal, K. G. H. Baldwin, P. T. H. Fisk, H.-A. Bachor et G. I. Opat, "Reflection and diffraction of sodium atoms by evanescent laser light fields", *Opt. Commun.* **73**, 331 (1989).

[99] S. Feron, J. Reinhardt, M. Ducloy, O. Gorceix, S. N. Chormaic, C. Miniatura, J. Robert, J. Baudon, V. Lorent et H. Haberland, "Multiphoton "Doppleron" resonances in atom reflection by a standing evanescent wave", *Phys. Rev. A* **49**, 4733 (1994).

[100] B. W. Stenlake, I. C. M. Littler, H.-A. Bachor, K. G. H. Baldwin et P. T. H. Fisk, "Observation of velocity-tuned resonances in the reflection of atoms from an evanescent light grating", *Phys. Rev. A* **49**, 16 (1994).

[101] J. E. Murphy, L. C. L. Hollenberg et A. E. Smith, "Velocity-tuned resonances in the diffraction of atoms by an evanescent field", *Phys. Rev. A* **49**, 3100 (1994).

[102] C. Henkel, A. M. Steane, R. Kaiser et J. Dalibard, "A modulated mirror for atomic interferometry", *J. Phys. II (France)* **4**, 1877 (1994).

[103] G. Armand et J. R. Manson, "Scattering of neutral atoms by an exponential corrugated potential", *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1839 (1979).

[104] G. Armand, "Scattering of neutral particles by a two-dimensional exponential corrugated potential", *J. Phys. (France)* **41**, 1475 (1980).

[105] J. D. McClure, "Surface rainbows: a similitude between classical and diffractive scattering of atoms from crystalline surfaces", *J. Chem. Phys.* **52**, 2712 (1970).

[106] J. D. McClure, "High-energy resolution calculations on atom–surface scattering: method and comparison with experiment for Ne/LiF", *J. Chem. Phys.* **57**, 2810 (1972).

[107] V. Khare et H. M. Nussenzveig, "Theory of the Rainbow", *Phys. Rev. Lett.* **33**, 976 (1974).

[108] P. L. Gould, G. A. Ruff et D. E. Pritchard, "Diffraction of atoms by light: the near-resonant Kapitza–Dirac effect", *Phys. Rev. Lett.* **56**, 827 (1986).

[109] C. S. Adams, T. Pfau, C. Kurtsiefer et J. Mlynek, "Interaction of atoms with a magneto-optical potential", *Phys. Rev. A* **48**, 2108 (1993).

[110] E. Arimondo, A. Bambini et S. Stenholm, "Quasiclassical theory of laser-induced atomic-beam dispersion", *Phys. Rev. A* **24**, 898 (1981).

[111] P. J. Martin, P. L. Gould, B. G. Oldaker, A. H. Miklich et D. E. Pritchard, “Diffraction of atoms moving through a standing light wave”, *Phys. Rev. A* **36**, R2495 (1987).

[112] M. Kuś, F. Haake et D. Delande, “Prebifurcation Periodic Ghost Orbits in Semiclassical Quantization”, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2167 (1993).

[113] M. V. Berry et C. Upstill, in *Progress in Optics XVIII*, édité par E. Wolf (North-Holland, 1980), pp. 259–346.

[114] L. D. Landau et E. M. Lifschitz, *Klassische Feldtheorie*, 10e édition (Akademie-Verlag, Berlin, 1987).

[115] W. F. Avrin et R. P. Merrill, “Simplified analysis of helium scattering: supernumerary rainbows from a soft, corrugated potential”, *Surf. Sci.* **311**, 269 (1994).

[116] J. Shen et A. Maradudin, “Multiple scattering of waves from random rough surfaces”, *Phys. Rev. B* **22**, 4234 (1980).

[117] D. P. Winebrenner et A. Ishimaru, “Investigation of a surface field phase-perturbation technique for scattering from rough surfaces”, *Radio Sci.* **20**, 161 (1985).

[118] D. P. Winebrenner et A. Ishimaru, “Application of the phase-perturbation technique to randomly rough surfaces”, *J. Opt. Soc. Am. A* **2**, 2285 (1985).

[119] K. Burke, B. Gumhalter et D. C. Langreth, “Nearly elastic scattering and the trajectory approximation”, *Phys. Rev. B* **47**, 12852 (1993).

[120] D. V. Kulginov et N. V. Blinov, “Semiclassical theory of atom-crystal scattering diffraction and interaction with phonons”, *Surf. Sci.* **313**, 120 (1994).

[121] A. Aspect, C. Henkel, G. Labeyrie et A. Landragin, in *Coherent and Collective Interactions of Particles and Radiation Beams*, Proceedings of the International School of Physics “Enrico Fermi”, Course CXXXI (Varenna 1995), édité par A. Aspect, W. Barletta et R. Bonifacio (Società Italiana de Fisica, 1996).

[122] K. Nakamura et S. A. Rice, “Nonadiabatic transitions and gauge structure”, *Phys. Rev. A* **49**, 2217 (1994).

[123] C. G. Shull, “Observation of *Pendellösung* fringe structure in neutron diffraction”, *Phys. Rev. Lett.* **21**, 1585 (1968).

[124] M. Marte et S. Stenholm, “Multiphoton resonances in atomic Bragg scattering”, *Appl. Phys. B* **54**, 443 (1992).

[125] P. Horak, K. M. Gheri et H. Ritsch, “Dynamic diffraction of atoms in the recoil-dominated regime”, *Quantum Semiclass. Opt.* **8**, 583 (1996).

[126] D. M. Giltner, R. W. McGowan et S. A. Lee, “Atom interferometer based on Bragg scattering from standing light waves”, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2638 (1995).

[127] M. K. Oberthaler, R. Abfalterer, S. Bernet, J. Schmiedmayer et A. Zeilinger, “Atom waves in crystals of light”, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4980 (1996).

[128] N. W. Ashcroft et N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders, Philadelphia, 1976).

[129] R. Petit, *Ondes électromagnétiques* (Masson, Paris, 1989).

[130] *Electromagnetic Theory of Gratings* (Topics in Current Physics, t. 22), édité par R. Petit (Springer, Heidelberg, 1980).

[131] G. Wolken, “Theoretical studies of atom–solid elastic scattering: He + LiF”, *J. Chem. Phys.* **58**, 3047 (1973).

[132] S. M. Tan et D. F. Walls, “Quantum effects in atomic reflection”, *J. Phys. II France* **4**, 1897 (1994).

[133] Lord Rayleigh, “On the dynamical theory of gratings”, *Proc. Roy. Soc. (London) Ser. A* **79**, 399 (1907).

[134] S. M. Tan et D. F. Walls, “Analysis of atomic mirrors based on light-induced forces”, *Phys. Rev. A* **50**, 1561 (1994).

[135] E. Kyrölä et S. Stenholm, “Velocity-tuned resonances as multi-Doppleron processes”, *Opt. Commun.* **22**, 123 (1977).

[136] C. Zener, “Non-adiabatic crossing of energy levels”, *Proc. Roy. Soc., Ser. A* **137**, 696 (1932).

[137] A. P. Kazantsev, G. A. Ryabenko, G. I. Surdovitch et V. P. Yakovlev, “Scattering of atoms by light”, *Phys. Rep.* **129**, 75 (1985).

[138] C. Miniatura, J. Robert, O. Gorceix, V. Lorent, S. L. Boiteux, J. Reinhardt et J. Baudon, “Atomic interferences and the topological phase”, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 261 (1992).

[139] D. L. Haavig et R. Reifenberger, “Dynamic transmission and reflection phenomena for a time-dependent rectangular potential”, *Phys. Rev. B* **26**, 6408 (1982).

[140] R. Golub et S. K. Lamoureaux, “Elucidation of the neutron coherence length and a matter-wave sideband interferometer”, *Phys. Lett A* **162**, 122 (1992).

[141] J. Felber, R. Gähler, C. Rausch et R. Golub, “Matter waves at a vibrating surface: Transition from quantum-mechanical to classical behavior”, *Phys. Rev. A* **53**, 319 (1996).

[142] L. Mandel et E. Wolf, *Optical coherence and quantum optics* (Cambridge University Press, 1995).

[143] J. P. Marioge, "Etat de surface. Défauts locaux et rugosité. II. La rugosité", *J. Optics (Paris)* **24**, 217 (1993).

[144] D. Sarid, *Scanning Force Microscopy* (Oxford University Press, New York, 1991).

[145] G. Armand et J. R. Manson, "Scattering by a hard corrugated wall: an exact solution", *Phys. Rev. B* **18**, 6510 (1978).

[146] W. A. Steele, "Isopotential surfaces and the corrugated wall model for gas–solid interactions", *Surf. Sci.* **97**, 478 (1980).

[147] H. Ogura et N. Takahashi, "Green function and radiation over a random rough surface", *J. Opt. Soc. Am. A* **2**, 2208 (1985).

[148] H. E. Bennett et J. O. Porteus, "Relation between surface roughness and specular reflectance at normal incidence", *J. Opt. Soc. Am.* **51**, 123 (1961).

[149] P. Debye, "Interferenz von Röntgenstrahlen und Wärmebewegung", *Ann. Phys. (Leipzig)* **43**, 49 (1914).

[150] J. Lapujoulade, Y. Lejay et G. Armand, "The thermal attenuation of coherent elastic scattering of noble gas from metal surfaces", *Surf. Sci.* **95**, 107 (1980).

[151] N. García et M. Nieto-Vesperinas, "Rough surface retrieval from the specular intensity of multiply scattered waves", *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3645 (1993).

[152] R. Carminati et J.-J. Greffet, "Two-dimensional numerical simulation of the photon scanning tunneling microscope. Concept of transfer function.", *Opt. Commun.* **116**, 316 (1995).

[153] Y. B. Ovchinnikov, J. Söding et R. Grimm, "Cooling atoms in dark gravitational laser traps", *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **61**, 23 (1995) [*JETP Lett.* **61**, 21 (1995)].

[154] J. Söding, R. Grimm et Y. B. Ovchinnikov, "Gravitational laser trap for atoms with evanescent-wave cooling", *Opt. Commun.* **119**, 652 (1995).

[155] Y. B. Ovchinnikov, D. V. Laryushin, V. I. Balykin et V. S. Lethokhov, "Cooling of atoms on reflection from a surface light wave", *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **62**, 102 (1995) [*JETP Lett.* **62**, 113 (1995)].

[156] P. Desbiolles et J. Dalibard, "Loading atoms in a bi-dimensional light trap", *Opt. Commun.* **132**, 540 (1996).

[157] P. Desbiolles, M. Arndt, P. Szriftgiser et J. Dalibard, “An elementary Sisyphus process close to a dielectric surface”, *Phys. Rev. A* (1996) **54**, 4292 (1996).

[158] G. S. Agarwal, “Interaction of electromagnetic waves at rough dielectric surfaces”, *Phys. Rev. B* **15**, 2371 (1977).

[159] H. M. Nussenzveig, J. T. Foley, K. Kim et E. Wolf, “Field Correlations within a Fluctuating Homogeneous Medium”, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 218 (1987).

[160] F. Gori, D. Ambrosini et V. Bagini, “Field correlations within a homogeneous and isotropic source”, *Opt. Commun.* **107**, 331 (1994).

[161] B. Taylor, K. J. Schernthanner, G. Lenz et P. Meystre, “The van Cittert–Zernike theorem in atom optics”, *Opt. Commun.* **110**, 569 (1994).

[162] J.-J. Greffet et R. Carminati, “Relationship between the near field speckle pattern and the statistical properties of a surface”, *Ultramicroscopy* **61**, 43 (1995).

[163] V. P. Chebotayev, B. Y. Dubetsky, A. P. Kazantsev et V. P. Yakovlev, “Interference of atoms in separated optical fields”, *J. Opt. Soc. Am. B* **2**, 1791 (1985).

Table des matières

Carsten Henkel

Réflexion et diffraction d'atomes lents par un miroir à onde évanescente

Résumé

Une onde évanescente lumineuse permet de réaliser un miroir à atomes, à condition que ceux-ci soient incidents avec une énergie cinétique suffisamment faible. Dans le régime de faible saturation, les atomes sont réfléchis de façon cohérente par un potentiel répulsif, le potentiel dipolaire. Nous caractérisons la réflexion d'un point de vue quantique, moyennant une solution analytique de l'équation de SCHRÖDINGER. La théorie de la diffraction d'atomes par une onde évanescente stationnaire est développée. Nous introduisons l'approximation du réseau de phase mince, valable dans le régime semi-classique, qui montre qu'en incidence normale la diffraction est efficace pour une faible modulation spatiale de l'intensité lumineuse. Pour interpréter la diffraction d'atomes en incidence rasante, il faut prendre en compte des transitions RAMAN stimulées entre les sous-niveaux magnétiques. La réflexion atomique devient diffuse lorsque la rugosité de la surface du diélectrique, au-dessus de laquelle se propage l'onde évanescente, dépasse la longueur d'onde atomique incidente. La distribution angulaire des atomes diffusés donne accès à la densité spectrale de rugosité pour des échelles spatiales autour de la longueur d'onde lumineuse.

Abstract

An evanescent light wave may realize an atomic mirror provided the atoms are incident with a sufficiently small kinetic energy. In the low-saturation regime, the atoms are coherently reflected by a repulsive potential barrier, *viz.* the dipole potential. We characterize the reflection quantum-mechanically, using an exact solution of the SCHRÖDINGER equation. The theory of atomic diffraction by a stationary evanescent wave is developed. Introducing the thin phase grating approximation which is valid in the semiclassical regime, we show that normally incident atoms are efficiently diffracted even for a weakly modulated light intensity. At grazing incidence, atomic diffraction may be interpreted in terms of RAMAN transitions between magnetic sublevels with different light shifts. The atomic reflection is diffuse rather than specular if the dielectric above which the evanescent wave propagates has a surface roughness larger than the atomic wavelength. The momentum distribution of the scattered atoms gives access to the roughness power spectrum at a length scale around the optical wavelength.

Mots clés

Miroir à atomes	Diffraction d'ondes de matière
Optique atomique	Surfaces rugueuses
Approximation semi-classique	Réflexion diffuse
Approximation de RAMAN–NATH	Fonction de cohérence