



HAL
open science

Collisions ion-atome sur cible préparée par laser : étude à haute résolution du processus de simple capture

A. Leredde

► **To cite this version:**

A. Leredde. Collisions ion-atome sur cible préparée par laser : étude à haute résolution du processus de simple capture. Optique [physics.optics]. Université de Caen, 2012. Français. NNT : . tel-00782102

HAL Id: tel-00782102

<https://theses.hal.science/tel-00782102>

Submitted on 29 Jan 2013

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

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

UNIVERSITE DE CAEN BASSE-NORMANDIE

N° attribué par la bibliothèque

--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

THÈSE

pour obtenir le grade de
DOCTEUR de l'Université de Caen Basse-Normandie

Spécialité : **Milieux dilués et optique fondamentale**
préparée au **Laboratoire de Physique Corpusculaire**
dans le cadre de l'École Doctorale **SIMEM**
(Arrêté du 7 août 2006)

présentée et soutenue publiquement
par

Arnaud LEREDDE

le 15 novembre 2012

Titre:

**Collisions ion-atome sur cible préparée par laser : étude à haute
résolution du processus de simple capture**

Directeur de thèse: **Dominique DURAND**
Co-Directeur de thèse: **Dominique HENNECART**

Jury

M. Bernard Pons Professeur Université de Bordeaux
M. Bertram Blank Directeur de Recherche, Université de Bordeaux I
Mme. Danielle Dowek, Directeur de Recherche, Université de Paris sud
M. Dominique Durand, Directeur de Recherche, CNRS, Université de Caen Basse-Normandie
M. Dominique Hennecart, Chargé de Recherche, CNRS, Université de Caen Basse-Normandie
M. Richard Brédy, Maître de Conférences, Université de Lyon I
M. Xavier Fléchar, Chargé de Recherche, CNRS, Université de Caen Basse-Normandie

Remerciements

Un doctorat est un diplôme très particulier, ce n'est pas le simple résultat de trois ans de thèse d'un étudiant passionné. Dans mon cas, cette thèse est un ensemble de rencontres des plus intéressantes au cours de *shifts*, d'écoles de physique, de conférences et tout simplement au sein du LPC-CAEN et du CIMAP. C'est aussi un grand nombre de "premières fois" qui constituent des défis à relever et qui m'ont aidé à avancer. Finalement, cette thèse m'aura permis de découvrir le monde de la recherche mais aussi une partie du monde dans lequel nous vivons tous, ce fût une expérience unique partagée avec beaucoup de personnes que je souhaiterai remercier.

Je tiens à remercier tout d'abord Monsieur Jean-Claude STECKMEYER de m'avoir accueilli au sein de son laboratoire, le LPC-CAEN.

Je souhaite également remercier mes directeurs de thèse, Messieurs Dominique DURAND et Dominique HENNCART pour leurs conseils avisés qui m'ont été d'une grande utilité. Merci au Capitaine de m'avoir initié tant aux aspects expérimentaux que théoriques de la physique des collisions atomiques. Merci Dudu pour ta sympathie, l'attention que tu portes à chacun des thésards et ta façon d'allier rigueur et bonne ambiance de travail au sein du LPC.

Pour certains, quelques mots ne suffiront pas à exprimer ma gratitude. Xav' tu es bien évidemment le premier d'entre eux. Je te remercie pour tout ce que tu m'as apporté, que serait un padawan sans son Maître Jédi ? Merci pour toutes les compétences que tu m'as transmises. Ton souci du détail, ta faculté à comprendre la physique et à prendre du recul pour trouver des solutions aux problèmes que nous avons rencontré resteront un exemple que je m'efforcerai de suivre. Enfin, un grand MERCI à toi pour tous les bons moments passés. Les longues nuits de *shifts* sur LIRAT comme sur ARIBE, où entre deux parties d'Arkanoïde et de Bomb Jack, la fusée LIRAT II aura atteint des sommets. Merci pour tous tes conseils lors des matchs de squash, pour mes débuts en snow et la bonne humeur avec laquelle tu les prodigues.

Je veux également remercier très particulièrement Amine. Tu as toujours été disponible pour venir compléter l'équipe de choc composée de Dudu, du Capitaine et de Xav'. Ton expérience et tes suggestions m'ont permis d'appréhender, avec plus de sérénité, bien des conférences. Je ne pouvais espérer meilleure équipe pour m'encadrer. Conseils, encouragements, humour font une très bonne recette, merci donc (une dernière fois) à vous quatre !

Un grand merci également à toi, Bernard, pour ta gentillesse, ton accueil à Bordeaux et ta disponibilité. Si j'ai un regret lors de ma thèse, c'est de ne pas avoir pu approfondir plus l'aspect théorique. Néanmoins, grâce à toi, j'en aurai eu un aperçu attractif. Merci également d'avoir pris le temps d'examiner mes travaux avec soin. J'en profite pour remercier ceux qui ont partagé cette tâche avec toi, merci à Dominique Dowek, Richard Brédy et Bertram Blank.

Merci à tous ceux qui ont rendu ma thèse possible. Je pense en particulier à Jef pour m'avoir réparé le *switch* aussi rapidement. Merci à Hervé pour le temps que tu as passé avec Xavier et moi sur le spectromètre. Merci à Philippe et Yvan pour l'alignement de la chambre et pour

toutes les fois où je suis venu faire appel à vos services sans prévenir. Enfin, merci à Christophe et désolé pour les désagréments causés par la clim.

Comme je le disais au début, ma thèse ne se limite pas au simple travail sur mon sujet de recherche. Je tiens donc à remercier certaines personnes qui ont toutes eu un rôle important au cours de ces trois dernières années.

Je vais commencer par mon binôme, en T.P. comme en pause. Depuis la L1 la route est longue, même si maintenant on se dit que tout est passé très vite ! Merci Jérémy, la thèse aurait sûrement eu une tout autre dimension sans nos discussions, entre théorie et expérience on a quand même réussi à s'entendre pendant huit ans.

Je tiens également à remercier l'ensemble des thésards, nouveaux comme anciens, ainsi que certains postdoc et jeunes recrues pour les bons moments partagés autour d'un verre et pour la convivialité et l'esprit d'équipe qui j'espère perdurera. Merci plus particulièrement à l'équipe de riders du LPC, Claire, Greg, Sam et Benoit. Les sessions skate et les weekends de wake resteront parmi mes meilleurs souvenirs ! J'espère pouvoir vous retrouver à l'occasion d'un break moustachu à Moncontower !

Enfin, je souhaite également remercier les personnes du CIMAP, tous ceux avec qui je suis parti en conférences ou en école. Merci de m'avoir intégré à votre groupe et merci pour votre soutien lors des différentes présentations. Merci également d'avoir transformé chaque voyage en un enrichissement personnel dans une ambiance toujours (très) conviviale.

Table des matières

Remerciements	iii
Table des matières	v
Introduction	1
1 Approche théorique	5
1 États électroniques du système NaRb ⁺	6
1.1 Optimisation des potentiels modèles $V_{Na}(r_{Na})$ et $V_{Rb}(r_{Rb})$	6
1.2 États moléculaires	9
2 Calculs dynamiques	11
2.1 Équations couplées	13
2.2 Sections efficaces différentielles et totales dans le cas de cibles non orientées	14
2.3 Introduction de la fonction de coupure $F_{cut}(b)$	15
2.4 Validation du traitement semi-classique par comparaison formelle avec les sections efficaces quantiques	15
2.5 Sections efficaces différentielles et totales dans le cas de cibles orientées .	16
2.5.1 Définition des repères utilisés	16
2.5.2 Calcul de l'amplitude de transition dans le repère photonique fixe	19
2.5.3 Calcul des matrices de rotation	20
2.5.4 Probabilités et sections efficaces entre états orientés	22
2 Approches expérimentales	25
1 La technique MOTRIMS	26
1.1 La spectroscopie d'impulsion d'ion de recul (RIMS)	26
1.1.1 Détermination complète de la cinématique de la collision	26
1.1.2 Conclusion	30
1.2 Production d'une cible froide dans un piège magnéto-optique (MOT) . .	30
1.2.1 Le refroidissement laser	30
1.2.2 Le piégeage laser	31
1.3 Piégeage du ⁸⁷ Rb	32
1.4 Le couplage du spectromètre d'impulsion d'ion de recul et du piège magnéto-optique	34
1.5 Apport de la technique MOTRIMS : Traitement de la cible dans des états excités	35
1.5.1 Mesure du rapport des sections efficaces sur cible excitée ou dans l'état fondamental	35
1.5.2 Mesure de la fraction excitée	37

2	Le dispositif LPC-MOT	37
2.1	Le piège magnéto-optique	38
2.1.1	La cavité laser	38
2.1.2	Les modulateurs acousto-optiques (AOM)	39
2.1.3	Montage optique	40
2.1.4	Asservissement des fréquences lasers	40
2.1.5	Le champ magnétique de piégeage	44
2.1.6	Caractérisation de la cible froide	45
2.2	Le spectromètre d'impulsion d'ion de recul	48
2.2.1	Principe de la focalisation en position et en temps de vol (TOF) des ions de recul	50
2.2.2	Simulation des propriétés de focalisation du spectromètre	52
2.3	Le faisceau projectile	53
2.3.1	La source d'ion	53
2.3.2	La mise en forme du faisceau projectile	54
2.3.3	L'analyse en charge après la zone de collision	56
2.4	Le système de détection	56
2.4.1	Les détecteurs d'ions de recul et de projectiles	56
2.4.2	Le traitement logique des signaux	57
2.5	Dispositif dédié à l'étude de la capture électronique sur cible polarisée	59
2.5.1	Principe de polarisation	60
2.5.2	Montage expérimental	61
2.5.3	Caractérisation de la cible polarisée	62
2.6	Les séquences en temps utilisées pour les faisceaux lasers	64
3	Analyse des données	67
1	Filtres sur les données brutes	67
1.1	Filtres sur le temps de vol des ions de recul	67
1.2	Reconstruction et filtres des temps des MCPs et des anodes	68
2	Reconstruction et filtres des observables	69
2.1	Position du projectile	69
2.2	Sélection des événements sans champ magnétique	70
3	Correction des effets systématiques	71
4	Sélection de l'état de la cible	72
4.1	Expérience sur cible dans le fondamental ou excitée	72
4.2	Cible orientée	74
5	Détermination du vecteur impulsion de l'ion de recul	75
6	Sections efficaces différentielles et angle de diffusion	78
6.1	Sections efficaces relatives	78
6.2	Rapport des sections efficaces sur cible excitée ou dans l'état fondamental	78
6.3	Distributions en angle de diffusion	78
4	Résultats théoriques et expérimentaux	81
1	Étude de la capture électronique sur cibles non polarisées	81
1.1	Sections efficaces relatives	82
1.1.1	$\text{Na}^+ + {}^{87}\text{Rb}(5s)$	83

1.1.2	Na ⁺ + ⁸⁷ Rb(5p)	85
1.1.3	Rapport des sections efficaces totales	88
1.2	Dynamique de la collision	88
1.3	Sections efficaces différentielles	92
1.3.1	Système Na ⁺ +Rb(5s)	93
1.3.2	Système Na ⁺ +Rb(5p)	96
1.4	Conclusion	99
2	Étude de la capture électronique sur cibles polarisées	100
2.1	Résultats expérimentaux et théoriques	101
2.1.1	Sections efficaces différentielles	101
2.1.2	Potentiel d'interaction internucléaire	105
2.2	Modèles simples pour la capture sur cible orientée	107
2.2.1	Les règles de propension (<i>propensity rules</i>)	107
2.2.2	Modèle du <i>velocity matching</i>	108
2.3	Confrontation des modèles	109
	Conclusion et perspectives	115
	Bibliographie	121

Introduction

Le travail de thèse présenté dans ce manuscrit est une étude théorique et expérimentale du processus de simple capture électronique, dans les collisions ions-atomes. Ce processus est dominant pour la gamme dite des basses vitesses de collision, c'est-à-dire lorsque la vitesse du projectile est inférieure à celle de l'électron actif, ce qui en fait un mécanisme présent dans un grand nombre de systèmes physiques. En effet, les processus d'échange de charge sont présents dans les plasmas, qu'ils soient créés au sein d'un TOKAMAK ou astrophysiques [1, 2], et jouent un rôle important dans l'endommagement des tissus biologiques par impact d'ions [3, 4]. Les expériences permettent de remonter aux observables pertinentes de ces processus, pour certains systèmes et à des énergies bien définies. Si les modèles théoriques sont validés par l'expérience pour ces conditions particulières, ils peuvent alors permettre de décrire les mécanismes mis en jeu pour des énergies intermédiaires par exemple.

Le projet présenté ici est le fruit de la collaboration d'un laboratoire de physique nucléaire, le LPC-CAEN (laboratoire de physique corpusculaire de Caen), et du CIMAP (le centre de recherche sur les ions, les matériaux et la photonique). Il arrive fréquemment que les techniques développées dans un domaine donné de la physique se généralisent et trouvent des applications dans d'autres domaines. C'est le cas ici, et les intérêts de ces deux laboratoires pour le dispositif expérimental développé sont différents. D'une part, le CIMAP s'intéresse directement à l'étude du processus de capture électronique à basse énergie à l'aide de la technique MOTRIMS (*Magneto-Optical Trap-Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy*), qui permet de tester avec une grande précision des calculs théoriques MOCC développés au CELIA (Centre lasers intenses et applications). D'autre part, le LPC-CAEN a la volonté d'appliquer cette technique, non triviale, à la recherche de physique dite au-delà du Modèle Standard de la physique des particules via l'étude de la décroissance β d'atomes radioactifs dans un piège.

Les techniques sur lesquelles se basent ce travail de thèse jouent également un rôle dans d'autres domaines de la physique que nous ne détaillerons pas ici mais qu'il est important de connaître. Par exemple, les MOTs trouvent des applications dans des domaines tels que la physique des atomes froids et ultra-froids où il constituent le point de départ vers la formation de condensats de Bose-Einstein (BEC) [5]. Depuis leur invention, ce type de piège a également été utilisé à des fins plus concrètes telles que la création de fontaines et d'horloges atomiques [6].

Dans cette introduction, nous situons brièvement cette technique dans le contexte de recherche au sein duquel elle est apparue et nous présenterons ses applications dans le domaine des collisions atomiques. Nous verrons au chapitre 1, que les modèles théoriques permettant

de décrire la simple capture électronique apportent des résultats très précis qui offrent aux expérimentateurs une opportunité d'utiliser la technique MOTRIMS dans le but de tester leur validité.

La naissance de la technique MOTRIMS

L'époque pré-MOTRIMS

L'étude des collisions atomiques n'a cessé d'évoluer depuis les dernières décennies. De nombreuses techniques qui permettent d'étudier les processus mis en jeu lors de ces collisions se sont développées. L'ordre chronologique dans lequel sont apparues ces techniques va généralement avec un degré de complexité croissant des dispositifs utilisés ainsi qu'une amélioration de la précision sur les mesures effectuées. Les premières expériences visant à étudier l'échange de charge [7] permettaient d'obtenir des mesures de sections efficaces totales de capture multiple en ne détectant que le projectile. Plus tard, la mesure des états de charge du projectile et des ions de recul en coïncidence permet de déterminer les sections efficaces associées au nombre d'électrons capturés [8, 9, 10].

Pour obtenir des informations toujours plus précises sur l'interaction des particules lors de la collision, les techniques expérimentales s'orientèrent ensuite vers la mesure d'autres observables. Sont ainsi apparues, la spectroscopie de gain d'énergie [11, 12, 13], la spectroscopie d'électrons Auger [14], la spectroscopie de photons [15, 16] et finalement la spectroscopie d'ions de recul [17].

Pour des collisions binaires les observables pertinentes de la collision se trouvent aussi bien dans les impulsions finales du projectile que de l'ion de recul. Néanmoins, la variation relative d'énergie cinétique entre la voie d'entrée et la voie de sortie de la collision est beaucoup plus importante pour l'ion de recul que pour le projectile, ce qui fait de la spectroscopie d'impulsion d'ion de recul une technique plus précise. En prenant l'exemple de la capture électronique, que nous allons étudier tout au long de ce manuscrit, l'échange d'énergie, qui est de l'ordre de l'eV lors de la collision, est faible comparé aux keV d'énergie cinétique du projectile. Si la cible atomique est suffisamment froide, c'est-à-dire que son énergie cinétique est faible, on pourra alors mesurer précisément sa variation d'énergie cinétique.

Depuis quelques décennies la technique COLTRIMS (pour *COLd Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy*) a permis d'étudier un grand nombre de processus à l'échelle atomique en faisant collisionner des projectiles tels que les photons, les ions et les électrons avec des cibles très diverses, allant du simple atome aux agrégats de grandes tailles en passant par les structures moléculaires. Son succès vient du couplage d'un spectromètre d'impulsion d'ion de recul à un jet supersonique permettant de produire des cibles froides dont la température est typiquement de l'ordre de 1 K. Cette technique fût initiée à la fin des années 1990. De nombreux ouvrages décrivent les possibilités et les performances offertes par cette technique [18, 19, 20, 21, 22].

Les opportunités de la technique MOTRIMS

Malgré les avantages que présente la technique COLTRIMS, certaines contraintes inhérentes au dispositif expérimental utilisé limitent sa résolution. La production de cibles à l'aide d'un jet supersonique contraint l'expérimentateur à ne pouvoir utiliser pour cible que des gaz rares. De plus, la température, bien que basse, reste le facteur limitant la résolution expérimentale des observables reconstruites. C'est donc en diminuant encore la température de la cible que

l'on peut améliorer cette résolution. En 1987, Raab *et al.* [23] ont pour la première fois réussi à réaliser le piégeage magnéto-optique d'atomes. Cette technique, moins facile à mettre en œuvre qu'un jet supersonique, permet de réduire la température de trois ordres de grandeur par rapport aux cibles produites par les jets supersoniques. Il est alors évident qu'en couplant cette nouvelle technique de production de cibles à un spectromètre d'impulsion d'ion de recul, la résolution expérimentale sur les observables de la collision pourra être améliorée. C'est au début des années 2000 que ce couplage fût réalisé, donnant naissance à la technique MOTRIMS. La résolution des expériences utilisant ce nouveau dispositif n'est plus limitée par la température de la cible mais par la résolution intrinsèque du dispositif de mesure utilisé. L'amélioration de la résolution que permet cette technique n'est pas l'unique intérêt qui pousse à investir dans son développement. En effet, les cibles atomiques produites dans un MOT sont plus variées que celles proposées par les jets supersoniques. Il est possible de piéger des alcalins, des alcalinos-terreux et des gaz rares. Enfin, le refroidissement et le piégeage par lasers implique que les atomes piégés peuvent être facilement préparés à l'aide de ces mêmes lasers. Ainsi les expériences peuvent utiliser des cibles dans des états excités, orientés, ou bien encore alignés.

Les dispositifs MOTRIMS en physique des collisions

Comme nous venons de le voir, la source d'atomes froids produite par un MOT peut servir à différentes expériences de collisions atomiques. Nous allons maintenant donner un aperçu des différentes expériences ayant utilisé cette technique.

En 2001, plusieurs groupes se sont lancés dans l'étude de la capture électronique sur cible froide en utilisant la technique MOTRIMS. Ces dispositifs sont ceux de KSU (*Kansas State University*) au Kansas, de KVI (*Kernfysisch Versneller Instituut*) à Groningen, celui du NBI (*Niels Bohr Institute*) au Danemark et celui du travail présenté ici pour le LPC-CAEN.

D'autres groupes ont également utilisé le piégeage magnéto-optique pour réaliser des collisions mais sans spectroscopie d'impulsion d'ion de recul. On peut citer par exemple Harvey et Murray qui ont développé un AC-MOT [24] (*Alternative current MOT*) pour le piégeage du potassium et l'étude de l'ionisation par impact d'électrons, ainsi que D. Fischer, qui a développé le piégeage du lithium pour l'étude de la triple ionisation [25].

La technique MOTRIMS en physique nucléaire

Comme nous l'avons évoqué précédemment, les MOTs ont des applications au delà de la physique atomique. Les cibles froides produites peuvent être utilisées pour des mesures de précision dans d'autres domaines, et notamment en physique nucléaire.

Certains noyaux exotiques présentent une structure particulièrement intéressante qui pourrait nous renseigner sur l'interaction forte encore mal connue. Ces noyaux dits à *halo* ont des neutrons orbitant autour de leur cœur. Dans ce domaine, les isotopes d' ${}^6\text{He}$ et d' ${}^8\text{He}$, composés d'un cœur d' ${}^4\text{He}$ autour duquel orbitent respectivement deux et quatre neutrons, ont été étudiés récemment dans le but de mesurer leur rayon de charge via le *shift* isotopique d'une transition atomique [26, 27]. Cette mesure est effectuée au sein d'un MOT.

Dans une autre thématique de recherche, deux groupes, TRIUMF [28] à Vancouver et le *Lawrence Berkeley National Laboratory* [29] en Californie, ont utilisés des MOTs dans le but de tester les prédictions du Modèle Standard (SM pour *Standard Model*) de la physique des

particules. Brièvement, le Modèle Standard permet de décrire trois des quatre interactions fondamentales, à savoir les interactions forte, faible et électromagnétique. Néanmoins, ce modèle possède un grand nombre de paramètres libres qui sont fixés par les mesures expérimentales. Certaines observations expérimentales mettent déjà en défaut cette théorie mais elle reste à l'heure actuelle la plus complète et la plus aboutie. Dans le cas de l'interaction faible, le modèle standard prévoit que, lors de décroissances β nucléaires, seuls les courants Vecteur et Axial-vecteur doivent s'exprimer. Ceci impose pour une transition donnée que le paramètre de corrélation, $a_{\beta\nu}$, lié à l'angle d'émission entre le neutrino et la particule β soit fixé. Mesurer une déviation de ce paramètre serait le signe de courants exotiques et donc impliquerait une nouvelle physique au delà du Modèle Standard. Ces expériences demandent la mesure précise du spectre en énergie de recul du noyau fils après la décroissance β . Ce dernier est obtenu à l'aide d'un dispositif de type MOTRIMS.

Le LPC CAEN souhaiterait, à l'avenir, développer un MOT à atomes radioactifs afin de réaliser des expériences de précision similaires à celles faites à Vancouver et à Berkeley.

Plan du manuscrit

Le travail de thèse présenté dans ce manuscrit est une étude conjointe, théorique et expérimentale, des processus de capture dans les collisions Na^+ sur cible de Rb à basse énergie.

Dans un premier temps nous allons décrire et justifier le choix des modèles théoriques employés pour décrire le processus de simple capture électronique à basse énergie étudié ici. Dans une seconde partie, les principes de la méthode expérimentale ainsi que le dispositif utilisé seront présentés. Enfin, nous présenterons les résultats expérimentaux et théoriques obtenus ainsi que leur confrontation.

Chapitre 1

Approche théorique

Au cours de ce travail de thèse, les expériences menées sur les processus de capture électronique à basse énergie ont fourni des résultats très précis. Afin d'en tirer des informations complètes sur les mécanismes de la collision, il est nécessaire de réaliser des calculs précis se basant sur des modèles théoriques les plus rigoureux possibles.

De nombreux modèles théoriques ont été élaborés pour expliquer les mécanismes régissant le processus de capture électronique à basse énergie. Parmi eux, on peut citer quelques modèles simples comme celui de la barrière coulombienne [30] complété par la suite par d'autres théoriciens ([31, 32, 33]), ou bien encore celui bien connu de Landau-Zener [34, 35]. Ces modèles ont l'avantage de donner directement un ordre de grandeur des sections efficaces sans nécessiter de gros calculs. Ils ont cependant l'inconvénient d'être trop approximatifs. Dans le sens de la complexité croissante, on peut citer le modèle classique CTMC [36, 37, 38, 39, 40, 41] (*Classical trajectory Monte-Carlo*). Il s'agit plus d'un calcul de simulation permettant de tester la faisabilité d'une expérience que d'un calcul théorique donnant des détails sur les mécanismes de réaction. Néanmoins, les calculs CTMC peuvent donner des résultats très précis par exemple pour des transitions vers des états très excités.

Actuellement, ce sont les calculs *close-coupling* qui donnent les meilleurs résultats à basse énergie. En contre partie, ils sont délicats à mettre en œuvre. Dans ce cadre, on peut considérer que lors de la collision, le projectile et la cible sont suffisamment proches et lents pour former une quasi-molécule. Deux états particuliers de cette molécule s'identifient à la voie d'entrée avant association et à la voie de sortie après dissociation. C'est la vitesse relative projectile-cible qui induit les transitions entre les deux états moléculaires par l'intermédiaire des couplages radial et rotationnel non adiabatiques.

Dans le cas de la collision $\text{Na}^+ + {}^{87}\text{Rb}$, seul l'électron le plus externe est actif, nous utiliserons la technique des potentiels modèles pour décrire l'écrantage dû aux électrons de cœur. Dans notre calcul MOCC (*Molecular orbital close-coupling*), les états électroniques de la quasi-molécule seront déterminés sur une base d'orbitales moléculaires. On comparera au chapitre 3 ces résultats à ceux issus de calculs TCAOCC (*Two center atomic orbital close-coupling*) qui utilisent une base atomique sur chacun des deux centres. Dans ce cas, la base n'est pas très bien adaptée au problème moléculaire et nécessite un grand nombre d'orbitales pour être suffisamment complète.

Le mouvement des noyaux sera finalement inclus, ce qui donne les équations couplées de la collision. Dans un souci de simplicité et de compréhension, on traite classiquement le mouvement des noyaux dans le cadre de l'approximation semi-classique. Cette approximation n'est plus

valide lorsque le mouvement des noyaux est trop lent, nous avons donc également réalisé un calcul complètement quantique pour tester la validité de l'approche semi-classique.

1 États électroniques du système NaRb⁺

Les transitions électroniques sont ici considérées dans le cadre de l'approximation à un seul électron actif [42] (SAE, *Single active electron*), pour laquelle les cœurs ioniques Na⁺[1s²2s²2p⁶] et Rb⁺[1s²2s²2p⁶...4p⁶] sont considérés comme gelés au cours de la collision.

Nous utiliserons les unités atomiques tout au long de ce chapitre. L'hamiltonien du système s'écrit alors :

$$H = -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{Na}(r_{Na}) + V_{Rb}(r_{Rb}) + \frac{1}{R} \quad (1.1)$$

où les potentiels $V_{Na}(r_{Na})$ et $V_{Rb}(r_{Rb})$ sont les potentiels modèles qui décrivent l'interaction de l'électron actif respectivement avec les cœurs ioniques de Na⁺ et Rb⁺. Les vecteurs \vec{r}_{Na} et \vec{r}_{Rb} représentent respectivement les positions de l'électron par rapport au Na⁺ et au Rb⁺. Pour simplifier les expressions, les calculs sont effectués dans un repère lié à la quasi-molécule dont l'origine est placée au centre de masse, sur l'axe internucléaire. On note qR la distance du sodium à l'origine du repère et pR celle de l'origine du repère au rubidium. Les vecteurs position de l'électron peuvent alors s'écrire en fonction des vecteurs positions absolus dans le repère choisi et il vient $\vec{r}_{Na} = \vec{r} - q\vec{R}$ et $\vec{r}_{Rb} = \vec{r} + p\vec{R}$ (voir figure 1.1).

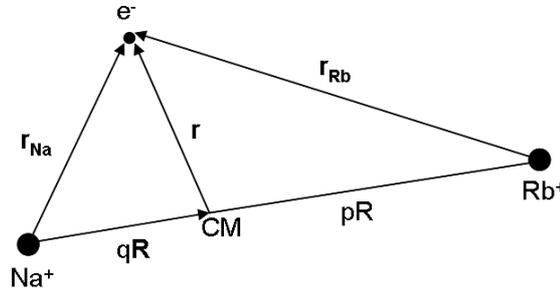


FIGURE 1.1: Représentation des vecteurs positions des participants à la collision dans le repère choisi.

Le terme en $1/R$ traduit quant à lui l'interaction électrostatique moyenne entre les deux cœurs ioniques.

1.1 Optimisation des potentiels modèles $V_{Na}(r_{Na})$ et $V_{Rb}(r_{Rb})$

Les potentiels modèles $V_{Na}(r_{Na})$ et $V_{Rb}(r_{Rb})$ sont recherchés sous une forme analytique donnée par :

$$V(r) = -\frac{1}{r} - (Z - 1) \frac{e^{-b_1 r}}{r} - b_2 e^{-b_3 r} \quad (1.2)$$

où Z est la charge nucléaire ($Z_{Na} = 11$ et $Z_{Rb} = 37$) et $\{b_1, b_2, b_3\}$ un jeu de paramètres optimisé de manière à reproduire aussi précisément que possible les états d'énergies de l'électron de valence du sodium et du rubidium.

	b_1	b_2	b_3
$\text{Na}^+ + e^-$	2.810	2.850	2.085
$\text{Rb}^+ + e^-$	3.923	5.825	1.333

TABLE 1.1: Paramètres optimisés pour les potentiels modèles du sodium et du rubidium.

L'optimisation de ces paramètres se fait par diagonalisations itératives de l'hamiltonien atomique $H_{\text{Na},\text{Rb}}$ correspondant respectivement aux limites où ($R \rightarrow \infty, r_{\text{Rb}} \rightarrow \infty$) et ($R \rightarrow \infty, r_{\text{Na}} \rightarrow \infty$) en faisant varier les paramètres $\{b_i\}$ jusqu'à ce que les énergies propres obtenues correspondent aux données de référence. Les références prises dans ce cas sont celles tabulées dans le NIST [43] (*National Institute of Standard and Technology*). L'hamiltonien est diagonalisé sur une base STO (*Slater type orbitals*) dite "even-tempered" [44], suffisamment complète pour permettre de décrire correctement les états concentrés autour des centres nucléaires :

$$S_j^{(l,m)}(\vec{r}) = \mathcal{N}_j^{(l)} r^l e^{-\alpha_j r} Y_l^m(\Omega) \quad (1.3)$$

où $\mathcal{N}_j^{(l)}$ est un facteur de normalisation et $Y_l^m(\Omega)$ sont les harmoniques sphériques. Pour toutes les symétries du moment angulaire (l, m), les paramètres α_j suivent une série géométrique telle que :

$$\alpha_j = \alpha_0 \beta^j, \quad 0 \leq j \leq j_{\text{max}} \quad (1.4)$$

Afin que la base choisie soit suffisamment complète, il faut que le paramètre α_0 soit petit pour représenter les états diffus, β proche de 1 et j_{max} suffisamment grand pour représenter les états liés très concentrés sur le cœur et du continuum. Dans la pratique ce modèle fonctionne avec $\alpha_0 = 0.0005$ et $j_{\text{max}} = 50$, indépendamment de la symétrie (l, m) considérée. Les résultats de l'optimisation des paramètres b_i sont regroupés dans le tableau 1.1.

Le tableau 1.2 présente la comparaison des énergies obtenues par la méthode des potentiels modèles pour le Na avec les valeurs de références du NIST [43], en portant un intérêt particulier aux états fortement peuplés lors de collisions $\text{Na}^+ + {}^{87}\text{Rb}(5s,5p)$ à basse énergie. On peut noter un très bon accord entre les valeurs calculées ici et les données expérimentales de référence. En effet, l'écart relatif maximum n'excède pas 0.3%. L'ensemble des paramètres des potentiels modèles n'étant pas univoque, nous avons également calculé les énergies de valence de l'électron sur le Na en utilisant le potentiel modèle proposé par Magnier *et al.* [45], dont la forme analytique est similaire à la notre mais dont les paramètres b_i sont différents. Les deux potentiels modèles mènent à des résultats très similaires pour lesquels l'écart relatif le plus important est d'environ 0.4% pour l'état $4d$.

Bien que l'optimisation des potentiels modèles mène à une représentation correcte du spectre en énergie de l'électron de valence des atomes considérés, il se peut que les forces d'oscillateurs sensibles à la fonction d'onde ne soient pas correctement reproduites. Ces forces d'oscillateurs liées à la transition électronique d'un état a vers un état b sont de la forme :

$$f_{ab} = \frac{2(E_b - E_a)}{3} \|\vec{r}_{ab}\|^2 \quad (1.5)$$

avec

Etats nl_J	NIST (u.a.)	STO (u.a.)	OEDM (u.a.)
3s	-0.188858	-0.188645	-0.188642
4s	-0.071578	-0.071682	-0.071680
5s	-0.037584	-0.037640	-0.037612
6s	-0.023132	-0.023162	-0.023002
7s	-0.015662	-0.015680	
8s	-0.011304	-0.011315	
3p _{1/2}	-0.111600	-0.111666	-0.111663
3p _{3/2}	-0.111521		
4p _{1/2}	-0.050951	-0.051081	-0.051063
4p _{3/2}	-0.050926		
5p _{1/2}	-0.029202	-0.029273	-0.029216
5p _{3/2}	-0.029191		
6p _{1/2}	-0.018923	-0.018964	-0.018779
6p _{3/2}	-0.018917		
7p _{1/2}	-0.013256	-0.013281	
7p _{3/2}	-0.013252		
8p _{1/2}	-0.009801	-0.009817	
8p _{3/2}	-0.009801		
3d	-0.055936	-0.055789	-0.055789
4d	-0.031442	-0.031385	-0.031382
5d	-0.020106	-0.020078	-0.020028
6d	-0.013952	-0.013936	
7d	-0.010245	-0.010234	
8d	-0.007840	-0.007830	
4f	-0.031268	-0.031251	-0.031250
5f	-0.020010	-0.020001	-0.019953
6f	-0.013895	-0.013890	
7f	-0.010208	-0.010205	
8f	-0.007815	-0.007813	

TABLE 1.2: Comparaison des énergies de liaison du sodium fournies par le NIST avec les résultats du calcul semi-empirique obtenu dans la base STO et dans la base OEDM couplée à des gaussiennes (voir section 1.2).

$$\vec{r}_{ab} = \langle \phi_b | \vec{r} | \phi_a \rangle \quad (1.6)$$

où $(E_b - E_a)$ correspond à l'énergie de la transition électronique. Ces forces d'oscillateurs sont des moyennes statistiques sur les transitions entre sous-niveaux de moment angulaire J supposés dégénérés.

Nous avons donc calculé les forces d'oscillateurs pour 12 transitions dipolaires entre les états du sodium les plus impliqués lors des collisions traitées ici. La comparaison des résultats obtenus avec les données tabulées de la base de données *Opacity Project* (TOPBASE) [46] est présentée dans le tableau 1.3. Les déviations observées ne dépassent pas quelques pour cent

avec un minimum pour la transition $3s \rightarrow 3p$ qui implique les états les plus probables du point de vue de la collision, et un maximum de 9.1% pour la transition $4p \rightarrow 3d$. Les calculs effectués avec le potentiel modèle de Magnier *et al.* [45] donne des résultats très similaires.

Transitions	TOPBASE (u.a.)	B. Pons (u.a.)
$3s \rightarrow 3p$	-0.975	-0.976008
$3p \rightarrow 4s$	-0.171666	-0.168440
$3p \rightarrow 5s$	-0.014233	-0.0137918
$3s \rightarrow 4p$	-0.0132	-0.0135099
$4s \rightarrow 4p$	-1.455	-1.44402
$4p \rightarrow 5s$	-0.315	-0.311457
$3s \rightarrow 5s$	-0.00195	-0.00198805
$3p \rightarrow 3d$	-0.87	-0.853479
$3d \rightarrow 4p$	-0.124	-0.112710
$3p \rightarrow 4d$	0.0965	-0.101009
$4p \rightarrow 4d$	-0.973	-0.932745
$4d \rightarrow 5p$	-0.243	-0.218730

TABLE 1.3: Comparaison des forces d'oscillateurs fournies par la base de donnée TOPBASE [46] avec les résultats obtenus par la méthode des potentiels modèles pour le sodium.

Le tableau 1.4 présente la comparaison des énergies des états du Rb obtenus avec notre potentiel modèle et les valeurs de références du NIST [43]. Dans le cas du Rb les énergies calculées sont en bon accord avec les valeurs de référence. Comme dans le cas du Na, nous avons considéré un potentiel modèle alternatif, proposé par Lee *et al.* [47], ayant deux paramètres ajustables. Les résultats obtenus cette fois sont en moins bon accord avec les valeurs tabulées et donc avec les résultats obtenus avec notre potentiel modèle. Par exemple, pour l'état Rb(5p), impliqué dans les collisions sur cible excitée, un écart relatif de 8% est trouvé entre le potentiel modèle de Lee et la valeur de référence alors que notre potentiel modèle nous permet d'obtenir un écart relatif de 1%. Aymar *et al.* [48] propose un potentiel modèle dont la forme analytique est similaire à celle que nous avons utilisé mais qui inclut une polarisation du cœur ionique. L'accord obtenu avec le potentiel modèle d'Aymar est meilleur que celui obtenu avec le potentiel modèle de Lee mais reste moins bon que la description obtenue avec notre potentiel modèle.

Le bon accord obtenu entre les énergies des états du Na (tableau 1.2) et du Rb (tableau 1.4) et les valeurs de référence du NIST [43] nous permet d'avoir confiance dans nos potentiels modèles, utilisés pour représenter l'interaction de l'électron de valence avec les cœurs ioniques de Na^+ et Rb^+ , dans le cadre de l'approximation SAE (*single active electron*).

1.2 États moléculaires

Les états moléculaires liés χ_k de la quasi-molécule NaRb^+ , utilisés par les calculs MOCC, vérifient l'équation aux valeurs propres suivante :

$$H_{mol}\chi_k(R, \vec{r}) = E_k(R)\chi_k(R, \vec{r}) \quad (1.7)$$

Etats nl_J	NIST (u.a.)	STO (u.a.)	OEDM (u.a.)
5s	-0.153468	-0.153468	-0.153395
6s	-0.061776	-0.061780	-0.061757
7s	-0.033623	-0.033647	-0.033606
8s	-0.021177	-0.021177	-0.021079
9s	-0.014543	-0.014554	
10s	-0.010609	-0.010616	
5p _{1/2}	-0.096193	-0.095075	-0.095047
5p _{3/2}	-0.095110		
6p _{1/2}	-0.045453	-0.045306	-0.045183
6p _{3/2}	-0.045100		
7p _{1/2}	-0.026681	-0.026644	-0.026292
7p _{3/2}	-0.026521		
8p _{1/2}	-0.017569	-0.017557	
8p _{3/2}	-0.017483		
9p _{1/2}	-0.012447	-0.012447	
9p _{3/2}	-0.012396		
10p _{1/2}	-0.009281	-0.009277	
10p _{3/2}	-0.009248		
4d _{3/2}	-0.065316	-0.064989	-0.064981
4d _{5/2}	-0.065318		
5d _{3/2}	-0.036406	-0.036368	-0.036302
5d _{5/2}	-0.036393		
6d _{3/2}	-0.022798	-0.022780	-0.022487
6d _{5/2}	-0.022788		
7d _{3/2}	-0.015540	-0.015529	
7d _{5/2}	-0.015533		
8d _{3/2}	-0.011251	-0.011243	
8d _{5/2}	-0.011247		
9d _{3/2}	-0.008516	-0.008510	
9d _{5/2}	-0.008512		
10d _{3/2}	-0.006667	-0.006661	
10d _{5/2}	-0.006665		
4f	-0.031433	-0.031306	-0.031297
5f	-0.020107	-0.020045	-0.019983
6f	-0.013955	-0.013920	
7f	-0.010248	-0.010226	
8f	-0.007842	-0.007828	

TABLE 1.4: Comparaison des énergies de liaison du rubidium fournies par le NIST avec les résultats du calcul semi-empirique obtenu dans la base STO et dans la base OEDM couplée à des gaussiennes (voir section 1.2).

Ils ne peuvent pas être obtenus par diagonalisation de l'hamiltonien dans les bases STO

précédentes centrées sur Na et Rb. Nous avons donc décidé de diagonaliser l'hamiltonien sur une base OEDM (*one-electron diatomic molecule*), états propres de H_2^+ [49]. Cette base d'OEDM inclut 70 états mais elle n'est pas assez complète pour décrire correctement les fonctions d'ondes moléculaires χ_k . Nous avons donc complété la base d'OEDM par une base GTO (*Gaussian-type orbital*) d'orbitales gaussiennes centrées sur les deux noyaux :

$$G_k^{(n_1, n_2)}(\vec{r}_{Na, Rb}) = \mathcal{N}_k^{(n_1, n_2)} x_{Na, Rb}^{n_1} z_{Na, Rb}^{n_2} e^{-\alpha_k r_{Na, Rb}^2} \quad (1.8)$$

où $x_{Na, Rb}$ et $z_{Na, Rb}$ sont les coordonnées cartésiennes des vecteurs position de l'électron \vec{r}_{Na} et \vec{r}_{Rb} définis dans le repère moléculaire avec $\hat{z} // \hat{R}$ et $(\hat{x}, \hat{z}) = (\hat{v}, \hat{b})$. $\mathcal{N}_k^{(n_1, n_2)}$ un facteur de normalisation, où n_1 et n_2 sont des entiers tels que $0 \leq n_1 + n_2 \leq 2$. L'exposant α_k est une série géométrique, comme précédemment (equation (1.4)), $\alpha_k = \alpha_G \beta_G^k$ avec $\alpha_G = 0.03$, $\beta_G = 2.5$ et $0 \leq k \leq 14$ pour toutes les symétries ($n_1 + n_2$) considérées. La base OEDM complétée de la base GTO mène à un total de 280 états.

Les énergies asymptotiques $E_k(R \rightarrow \infty)$ obtenues par diagonalisation de l'hamiltonien dans la base totale OEDM+GTO sont représentées dans les tableaux 1.2 et 1.4, respectivement pour les états du Na et du Rb. Les déviations observées avec les STO sont inférieurs à 10^{-3} u.a. Ceci indique que la complétude de la base OEDM+GTO utilisée est suffisante pour décrire les états moléculaires asymptotiques, tout autant que la base STO précédente. Sur les 280 états résultants de la diagonalisation de l'hamiltonien, seuls 42, représentés dans les tableaux 1.2 et 1.4, sont retenus pour le calcul dynamique. Les autres états étant trop éloignés en énergie de la voie d'entrée de la collision pour être significativement peuplés aux énergies d'impact $E \leq 5$ keV.

La figure 1.2 représente le diagramme de corrélation du système $Na^+ + {}^{87}Rb(5s, 5p)$. Il décrit la dépendance en fonction de la distance internucléaire R des énergies moléculaires $E_k(R)$. Les résultats présentés ici sont comparés à ceux de Ghanmi *et al.* [50] qui utilise des pseudo-potentiels [51] complétés par des termes de polarisation du cœur [48] pour décrire l'interaction de l'électron de valence avec les cœurs ioniques. On observe un bon accord entre ces deux calculs sur l'ensemble de la gamme de distances internucléaires considérées. Il est important de noter que l'accord est également bon dans les régions où on observe des pseudo-croisements entre les niveaux moléculaires adjacents de même symétrie ; ceux-ci jouent un rôle important dans la dynamique de la collision à basse énergie. En utilisant le potentiel modèle de Magnier *et al.*, nous avons également calculé le diagramme de corrélation du système $NaRb^+$. Les résultats obtenus mènent à un diagramme de corrélation dont les niveaux sont indiscernables de ceux représentés sur la figure 1.2 pour des distances internucléaires telles que $R \geq 5$ u.a. Ce résultat est très satisfaisant si l'on tient compte que dans la région où $R < 5$ u.a. et où il y a recouvrement entre les deux cœurs ioniques, l'approximation consistant à utiliser des potentiels modèles n'est plus valide. En effet, les électrons de cœur vont également interagir avec l'électron actif du système.

Dans la partie dynamique des calculs qui va suivre nous verrons que la description du système $NaRb^+$ dans la région correspondant aux distances internucléaires faibles n'est pas satisfaisante.

2 Calculs dynamiques

Le mouvement des noyaux est traité classiquement alors que celui de l'électron actif est traité quantiquement. Dans la méthode semi-classique, aussi appelée approximation du paramètre

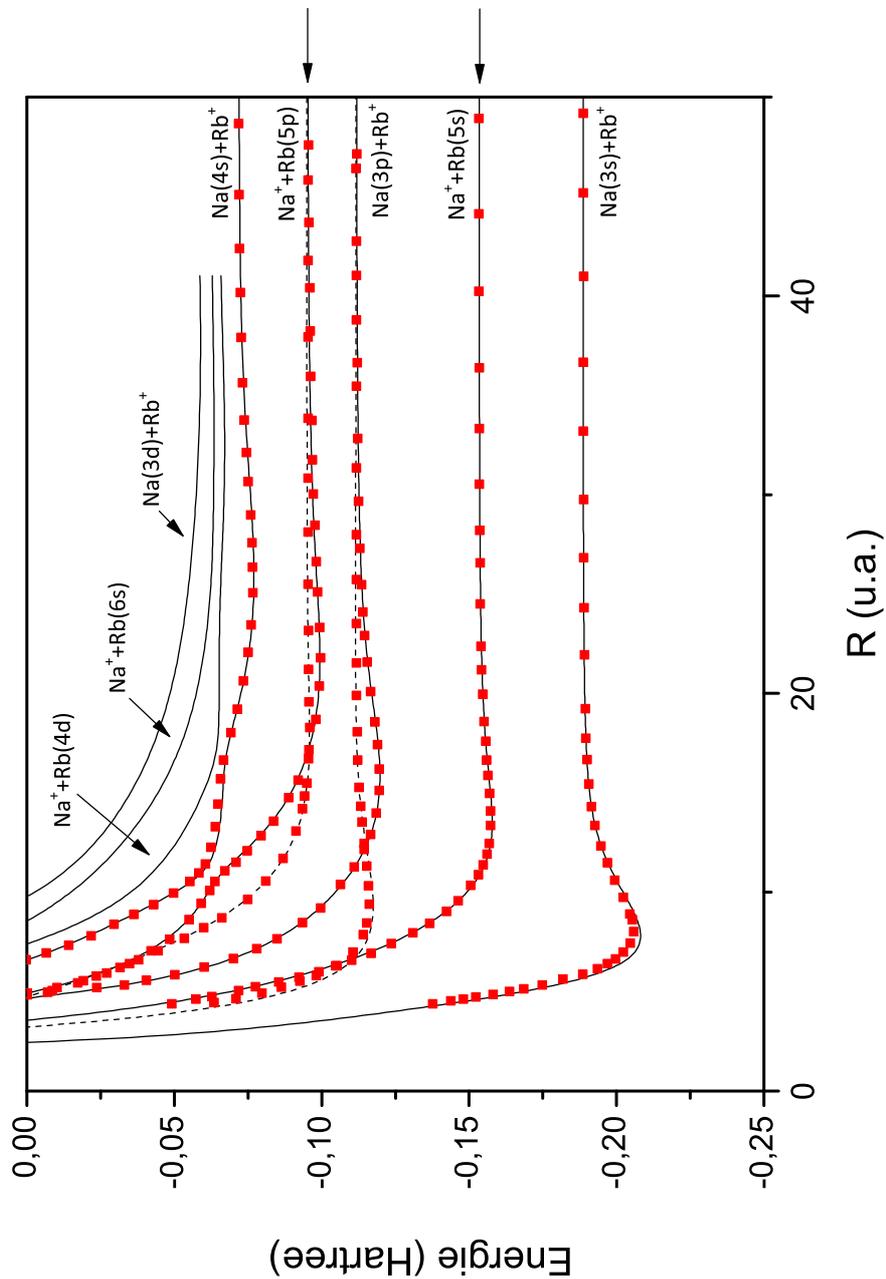


FIGURE 1.2: Diagramme de corrélation du système NaRb^+ , donnant les courbes d'énergie potentielle adiabatiques en fonction de la distance internucléaire pour les états 8σ (—) et 2π (- -) les plus liés de l'électron de valence. Les lignes correspondent au calcul présenté ici avec les potentiels modèles et la base OEDM+GTO et les points sont les résultats de Ghanmi *et al.* [50]

d'impact [52], que nous avons choisi d'utiliser, le mouvement des noyaux suit une trajectoire linéaire à vitesse constante. La distance internucléaire est alors donnée par l'équation classique :

$$\vec{R}(t) = \vec{b} + \vec{v}t \quad (1.9)$$

où \vec{b} est le paramètre d'impact de la collision, \vec{v} la vitesse du projectile et t le temps. Le mouvement des électrons obéit à l'équation eïkonale :

$$i\frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H\Psi(\vec{r}, t) \quad (1.10)$$

où H est l'hamiltonien électronique, $\Psi(\vec{r}, t)$ est la fonction d'onde totale électronique et \vec{r} la position de l'électron actif dans le repère dont l'origine est prise sur l'axe internucléaire aux distances pR de la cible et qR du projectile où p et q vérifient la condition (voir figure 1.1) :

$$p + q = 1 \quad (1.11)$$

2.1 Équations couplées

L'équation eïkonale est résolue en développant la fonction d'onde totale $\Psi_k(\vec{r}, t)$ sur un jeu de 42 orbitales moléculaires $\chi_k(\vec{r}, R)$ qui sont fonctions propres du hamiltonien moléculaire H_{mol} :

$$H_{mol}\chi_k(\vec{r}, R) = E_k\chi_k(\vec{r}, R) \quad (1.12)$$

La fonction d'onde totale s'écrit :

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{iU(\vec{r}, t)} \sum_{k=1}^{42} a_k(v, b; t)\chi_k(\vec{r}, R)e^{-i\int_0^t E_k(t')dt'} \quad (1.13)$$

où $U(\vec{r}, t)$ est le CTF [53] (*Common translation factor*) assurant l'invariance galiléenne et assurant le comportement correct aux limites asymptotiques de $\Psi(\vec{r}, t)$. Dans les calculs présentés ici nous avons utilisé le CTF donné par Errea *et al.* [53] et Harel *et al.* [54].

L'utilisation de la forme de la fonction d'onde 1.13 dans l'équation 1.10 mène à un système d'équations différentielles couplées du premier ordre pour les amplitudes $a_k(v, b; t)$:

$$\begin{aligned} \frac{da_k}{dt} = \sum_m a_m \left(\left\langle \chi_k \left| \frac{vt}{R} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{b^2}{R^2} iL_y - \frac{1}{2} \nabla^2 U - \nabla U \frac{\partial \nabla}{\partial t} \right| \chi_m \right\rangle \right. \\ \left. - i \left\langle \chi_k \left| \frac{1}{2} (\nabla U)^2 + \frac{\partial U}{\partial t} \right| \chi_m \right\rangle \right) e^{-i\int_0^t (E_m - E_k) dt'} \end{aligned} \quad (1.14)$$

où $\langle \chi_k | \frac{\partial}{\partial R} | \chi_m \rangle$ et $\langle \chi_k | iL_y | \chi_m \rangle$ sont respectivement les couplages radiaux et rotationnels [52]. Le système (1.14) est résolu numériquement entre $-t_{max}$ et $t_{max} = \frac{150}{v}$ en respectant les conditions initiales $a_k(v, b; -t_{max}) = \delta_{ik}$ et en prenant χ_i pour état initial. Nous obtenons alors l'amplitude de diffusion $t_{if}(v, b)$. Cette amplitude est liée à l'amplitude de transition vers l'état f au temps t_{max} par $t_{i \rightarrow f}(v, b) = a_k(v, b; t_{max})e^{-i\delta b/v}$ où la phase $\delta(b)$ dépendante de b , est :

$$\delta(b) = v_f(Z_{max}) + v_i(Z_{max}) - Z_{max}(\epsilon_f + \epsilon_i) - 2Q_T Q_P \ln b + (q_i + q_f) \ln(u) \quad (1.15)$$

avec

$$Z_{max} = vt_{max} \quad (1.16)$$

$$u = Z_{max} + \sqrt{Z_{max}^2 + b^2} \quad (1.17)$$

$$v_k(Z_{max}) = \int_0^{Z_{max}} E_k(Z') dZ' \quad (1.18)$$

$$\epsilon_k = \lim_{R \rightarrow \infty} E_k(R) \quad (1.19)$$

Q_T et Q_P sont respectivement les charges des cœurs ioniques de la cible et du projectile et q_k est lié au comportement asymptotique de l'état k tel que :

$$E_k(R) \sim \epsilon_k - q_k/R \quad (1.20)$$

2.2 Sections efficaces différentielles et totales dans le cas de cibles non orientées

La première partie de cette thèse a été consacrée à l'étude de la simple capture électronique à partir de cibles de Rb non polarisées. Les seules voies d'entrées possibles pour le système sont alors $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s)$ et $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p)$.

Dans le cas des collisions $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s)$, l'état initial χ_i définissant la condition entrante de la collision est unique (figure 4.2). Toutefois, dans le cas des collisions $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p)$, l'état initial n'est ni orienté, ni aligné, si bien que le flux initial est statistiquement partagé entre les états $5p\sigma$, $5p\pi^+$ et $5p\pi^-$. Le traitement des collisions $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p)$ nécessite alors trois résolutions distinctes du système d'équations couplées (1.14), avec pour chacune une des conditions initiales suivantes $\chi_i = 5p\sigma$, $\chi_i = 5p\pi^+$ et $\chi_i = 5p\pi^-$. On procède ensuite à la somme incohérente des résultats dynamiques associés à chacune des trois conditions initiales.

Dans le référentiel du centre de masse (cm), la section efficace différentielle associée au processus $i \rightarrow f$ est définie comme :

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega}(v, \Omega) = |T_{fi}|^2 \quad (1.21)$$

où T_{fi} est l'amplitude de transition dans l'angle solide Ω :

$$T_{fi} = \langle \chi_f | T | \chi_i \rangle = \mu v (-i)^{1+|\Delta m|} \int_0^\infty db b F_{cut}(b) J_{\Delta m}(2\kappa b \frac{\sin \theta_{cm}}{2}) |t_{i \rightarrow f}(v, b) - \delta_{if}| \quad (1.22)$$

et θ_{cm} est l'angle de diffusion du projectile dans le repère du centre de masse, $\kappa = \mu v$. μ est la masse réduite du système, $J_{\Delta m}$ une fonction de Bessel du premier ordre avec $\Delta m = |m_f - m_i|$, et $t_{i \rightarrow f}(v, b)$ est l'amplitude semi-classique de la transition à paramètre d'impact b fixé. $F_{cut}(b)$ est une fonction de coupure qui sera discutée dans la section suivante.

On voit que l'angle azimutal ϕ_{cm} n'apparaît pas dans l'expression (1.22) de l'amplitude de transition T_{fi} . Il en sera évidemment de même pour la section efficace différentielle $\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega}$, si bien que $\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega}$ ne dépend que de θ_{cm} et non de l'angle azimutal ϕ_{cm} :

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega}(v, \Omega) \equiv \frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega}(v, \theta_{cm}) \quad (1.23)$$

On calcule alors la section efficace différentielle dans le référentiel du laboratoire à partir de celle dans le centre de masse selon :

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\theta}(v, \theta) = \left| \frac{1 + 2\zeta \cos\theta_{cm} + \zeta^2}{1 + \zeta \cos\theta_{cm}} \right| \frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\theta_{cm}}(v, \theta_{cm}) \quad (1.24)$$

où $\zeta = M_{Na}/M_{Rb} = 0.2644$ est le rapport des masses atomiques. Dans le but de comparer les sections efficaces différentielles aux résultats expérimentaux, le résultat obtenu est convolué avec une fonction gaussienne dont la largeur à mi-hauteur est la résolution expérimentale $\Delta\theta$.

Finalement, la section efficace totale pour le processus $i \rightarrow f$ est obtenue en intégrant sur θ les sections efficaces différentielles :

$$\sigma_f(v) = 2\pi \int_{\theta} \frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\theta}(v, \theta) d\theta \quad (1.25)$$

2.3 Introduction de la fonction de coupure $F_{cut}(b)$

Dans l'équation (1.22), on a introduit une fonction de coupure $F_{cut}(b)$ telle que $F_{cut}(b) = 0$ pour $b \leq 4a.u.$, $F_{cut}(b) = 1$ pour $b \geq 6a.u.$, et $F_{cut} = b/2 - 2$ entre ces deux bornes, dans le but de supprimer les contributions dues à des transitions inélastiques qui n'ont pas de sens lorsque les cœurs ioniques du Na et du Rb se recouvrent. En effet, lorsque les cœurs ioniques se recouvrent, l'approximation consistant à décrire les électrons internes par un potentiel modèle devient erronée. Dans ce cas, pour certains canaux et surtout à basse vitesse de collision, les sections efficaces différentielles sont surévaluées aux grands angles de diffusion. C'est dans la dernière section de ce manuscrit, lorsque nous allons présenter les comparaisons entre les résultats expérimentaux et les calculs théoriques, que nous jugerons quantitativement de l'effet de la fonction $F_{cut}(b)$.

2.4 Validation du traitement semi-classique par comparaison formelle avec les sections efficaces quantiques

Il est légitime de se demander si la description semi-classique utilisée pour les calculs théoriques est appropriée à la description des collisions $Na^+ + Rb$ pour des énergies de projectile aussi faibles que 0.5 keV. Dans le traitement quantique de la collision, les sections efficaces différentielles dans le centre de masse sont définies comme :

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}^{(Q)}}{d\theta_{cm}} = \frac{1}{4\kappa^2} \left| \sum_j (2j+1) \sqrt{\frac{(j-\Delta m)!}{(j+\Delta m)!}} \times P_j^{\Delta m}(\cos\theta_{cm}) (S_{i \rightarrow f}^j - \delta_{if}) \right|^2 \quad (1.26)$$

où j est le moment angulaire total (nucléaire et électronique), $S_{i \rightarrow f}^j$ sont les éléments de la matrice de diffusion et $P_j^{\Delta m}$ est la fonction de Legendre associé de premier ordre.

En considérant que j , qui peut être défini par $j = \mu v b$, est grand à cause de la valeur élevée de μ ($\mu = 33398.5$ u.a.), on peut montrer formellement que les expressions quantiques et semi-classiques des sections efficaces différentielles mènent aux mêmes résultats. Ceci, même dans le cas extrême où $v = 0.0295$ u.a. et $b = 1$ donc pour $j \sim 1000$ u.a. En effet, en posant $j \gg \Delta m$, $(2j + 1)/2 \simeq j$ et $\sqrt{(j - \Delta m)!/(j + \Delta m)!} \simeq j^{-\Delta m}$, on peut réécrire l'équation (1.26) comme :

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}^{(Q)}}{d\theta_{cm}} \approx \frac{1}{\kappa^2} \left| \sum_j j^{1-\Delta m} P_j^{\Delta m}(\cos\theta_{cm})(S_{i \rightarrow f}^j - \delta_{if}) \right|^2 \quad (1.27)$$

Considérons d'autre part l'équation (1.22), sans tenir compte de la fonction de coupure. En supposant comme plus haut que les acteurs de la collisions sont suffisamment lourds pour que les angles de diffusion restent faibles, on peut faire l'approximation que $\sin(\theta_{cm}/2) \approx \theta_{cm}/2$. Suite à la correspondance entre j et b , on a $b = j/\mu v$. L'amplitude de transition semi-classique $t_{i \rightarrow f}$ peut être remplacée par l'amplitude de transition quantique analogue $S_{i \rightarrow f}$. En considérant tout ceci, et en discrétisant l'intégrale sur b , on obtient :

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}^{(SC)}}{d\theta_{cm}} \approx \frac{1}{\kappa^2} \left| \sum_j j J_{\Delta m}(j\theta)(S_{i \rightarrow f}^j - \delta_{if}) \right|^2 \quad (1.28)$$

Comme $j \gg \Delta m$, on peut considérer que :

$$J_{\Delta m}(\theta) \simeq j^{\Delta m} P_j^{-\Delta m}(\cos\theta) \quad (1.29)$$

et :

$$P_j^{-\Delta m}(\cos\theta) = (-1)^{\Delta m} (j - \Delta m)! P_j^{\Delta m}(\cos\theta) / (j + \Delta m)! \simeq (-1)^{\Delta m} P_j^{\Delta m}(\cos\theta) j^{-2\Delta m} \quad (1.30)$$

d'après Abramowitz [55]. On obtient finalement :

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}^{(SC)}}{d\theta_{cm}} \simeq \frac{1}{\kappa^2} \left| \sum_j j^{1-\Delta m} P_j^{\Delta m}(\cos\theta_{cm})(S_{i \rightarrow f}^j - \delta_{if}) \right|^2 \quad (1.31)$$

qui correspond bien à la forme simplifiée (1.27) des sections efficaces différentielles quantiques.

Dans notre cas, où la masse réduite est grande, les expressions des sections efficaces semi-classiques et quantiques sont identiques : On s'attend à ce qu'un calcul complètement quantique donne les mêmes résultats que le calcul semi-classique. Cela a été vérifié par J. Blicck [56] dans une étude antérieure.

2.5 Sections efficaces différentielles et totales dans le cas de cibles orientées

2.5.1 Définition des repères utilisés

La seconde partie de mon travail de thèse a été consacrée à l'étude de la simple capture électronique à partir d'une cible polarisée. Dans le repère photonique fixe ($Ox_{ph}, Oy_{ph}, Oz_{ph}$) schématiquement représenté sur la figure 1.3, le faisceau laser polarisé circulairement se propage selon l'axe (Oz_{ph}) et produit des cibles dans les deux états notés $|p, m = +1\rangle_{ph}$ et $|p, m = -1\rangle_{ph}$

uniquement mais ne permet pas de mettre les cibles dans l'état $|p, m = 0\rangle$. Ces états sont le produit d'une fonction radiale et d'une fonction angulaire qui n'est autre qu'une harmonique sphérique.

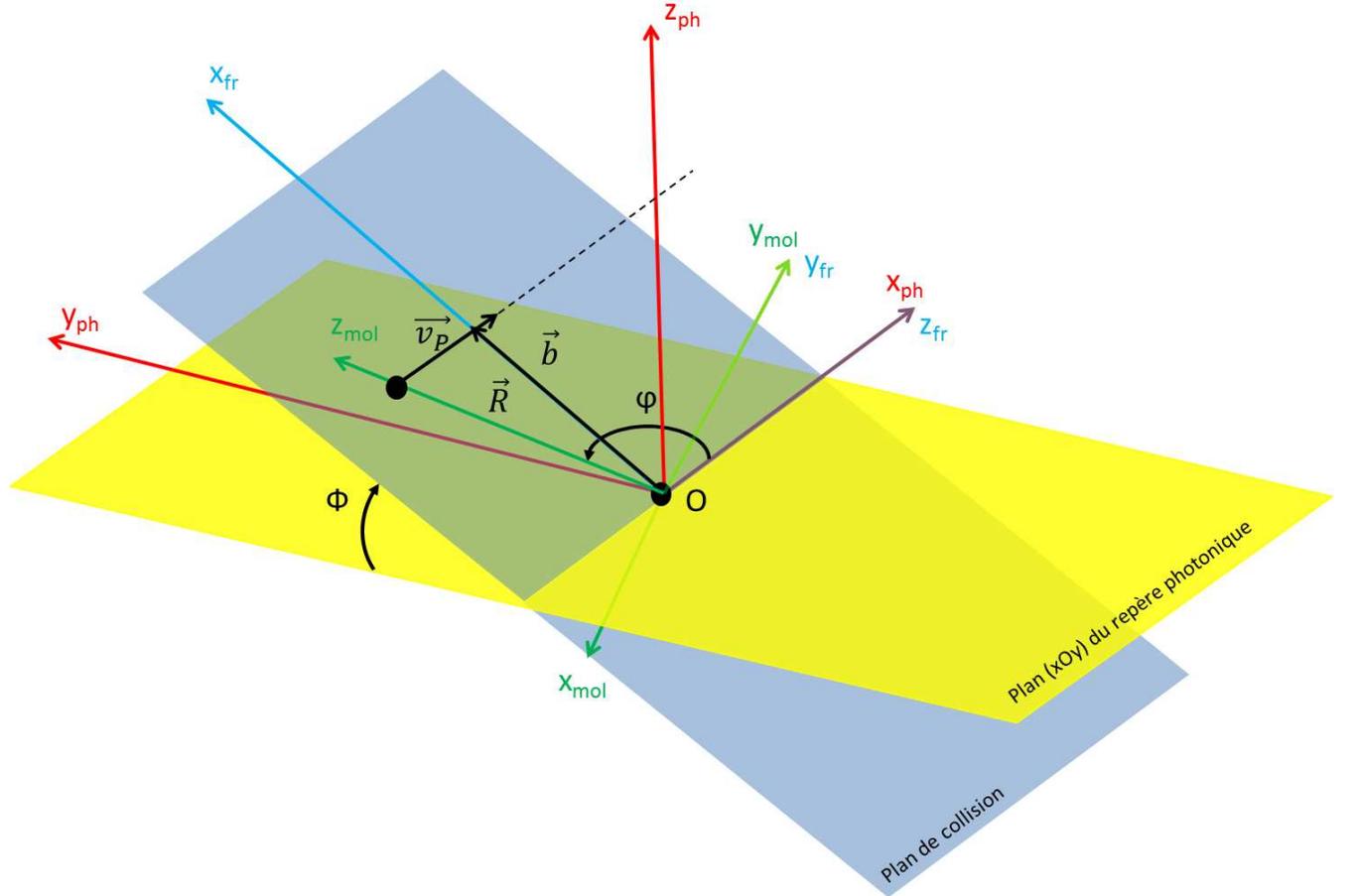


FIGURE 1.3: Représentation schématique des différents repères liés à la collision définis par Machholm *et al.* [57] pour des collisions $\text{Li}^+ + \text{Na}$.

Or les calculs MOCC ont été effectués dans la base des états χ_n définis dans le référentiel moléculaire tournant lié à la quasi-molécule $(Ox_{mol}, Oy_{mol}, Oz_{mol})$ tel que Oz_{mol} contient la distance internucléaire \vec{R} . Le passage du référentiel *photonique* au référentiel moléculaire est facilité si on passe par un référentiel intermédiaire fixe $(Ox_{fr}, Oy_{fr}, Oz_{fr})$ contenant le plan de collision tel que le paramètre d'impact \vec{b} soit dirigé selon (Ox_{fr}) et la vitesse du projectile selon (Oz_{fr}) . Ces référentiels sont définis par Machholm *et al.* [57] et illustrés par la figure 1.3.

Pour passer du référentiel photonique au référentiel fixe on utilise les angles d'Euler suivant la convention (z, y, z) qui consiste à effectuer trois rotations successives d'angles $(\alpha, \beta, \gamma) = (\pi, -\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} - \phi)$ autour des axes Oz , Oy et Oz . Ces rotations sont représentées sur la figure 1.4.

Les coordonnées se transforment de la manière suivante :

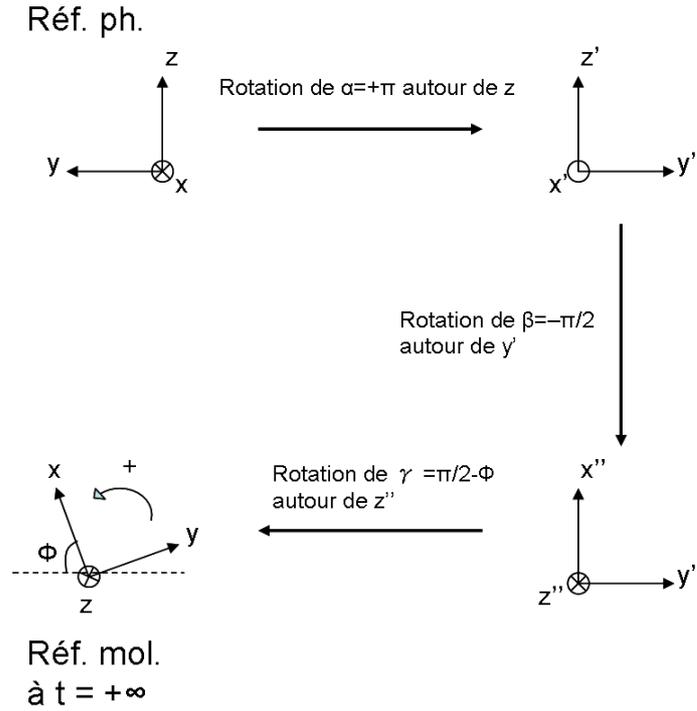


FIGURE 1.4: Représentation schématique des rotations des angles d'Euler dans la convention (z, y, z) .

$$\begin{pmatrix} x_{fr} \\ y_{fr} \\ z_{fr} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \cos\phi & \sin\phi \\ 0 & -\sin\phi & \cos\phi \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{ph} \\ y_{ph} \\ z_{ph} \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

ou

$$\begin{pmatrix} x_{ph} \\ y_{ph} \\ z_{ph} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{fr} \\ y_{fr} \\ z_{fr} \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

Il reste maintenant le passage du référentiel fixe au référentiel moléculaire où sont effectués les calculs MOCC. Ici il n'y a qu'une rotation d'angle φ autour de Oy_{fr} d'où les matrices de passage :

$$\begin{pmatrix} x_{mol} \\ y_{mol} \\ z_{mol} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & 0 & -\sin\varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\varphi & 0 & \cos\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{fr} \\ y_{fr} \\ z_{fr} \end{pmatrix} \quad (1.34)$$

et

$$\begin{pmatrix} x_{fr} \\ y_{fr} \\ z_{fr} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & 0 & \sin\varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\varphi & 0 & \cos\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{mol} \\ y_{mol} \\ z_{mol} \end{pmatrix} \quad (1.35)$$

On peut noter que le calcul de collision donnant les éléments de la matrice de transition est conduit dans le référentiel tournant pendant toute la durée de la collision, de $t = -\infty$

à $t = +\infty$. Nous n'aurons besoin de changer de repère qu'à ces deux moments particuliers $t = -\infty$ et $t = +\infty$. A chacun de ces instants, les coordonnées se transforment selon :

pour $t = -\infty, \varphi = \pi$

$$\begin{pmatrix} x_{fr} \\ y_{fr} \\ z_{fr} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{mol} \\ y_{mol} \\ z_{mol} \end{pmatrix} \quad (1.36)$$

soit

$$\begin{pmatrix} x_{ph} \\ y_{ph} \\ z_{ph} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -\cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{mol} \\ y_{mol} \\ z_{mol} \end{pmatrix} \quad (1.37)$$

et pour $t = +\infty, \varphi = 0$

$$\begin{pmatrix} x_{ph} \\ y_{ph} \\ z_{ph} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{mol} \\ y_{mol} \\ z_{mol} \end{pmatrix} \quad (1.38)$$

2.5.2 Calcul de l'amplitude de transition dans le repère photonique fixe

On cherche l'amplitude de transition d'un état $|\varphi_i^{ph}\rangle$ vers un autre état orienté $|\varphi_j^{ph}\rangle$ dans le repère photonique fixe à partir de l'amplitude de transition calculée dans le repère moléculaire tournant

$$\langle \chi_k^{mol} | T | \chi_l^{mol} \rangle \quad (1.39)$$

En utilisant les relations de fermeture, on peut écrire :

$$\langle \varphi_j^{ph} | T | \varphi_i^{ph} \rangle = T_{ji}^{orient} = \sum_k \sum_l \langle \varphi_j^{ph} | \chi_k^{mol} \rangle_{t=+\infty} \langle \chi_k^{mol} | T | \chi_l^{mol} \rangle \langle \chi_l^{mol} | \varphi_i^{ph} \rangle_{t=-\infty} \quad (1.40)$$

Les termes $\langle \varphi_j^{ph} | \chi_k^{mol} \rangle_{t=+\infty}$ et $\langle \chi_l^{mol} | \varphi_i^{ph} \rangle_{t=-\infty}$ ne sont rien d'autre que les éléments de matrice de rotation permettant de passer du référentiel moléculaire au référentiel photonique :

$$\left(R_{+\infty}^{mol \rightarrow ph} \right)_{jk} = \langle \varphi_j^{ph} | \chi_k \rangle_{t=+\infty} \quad (1.41)$$

et du référentiel photonique au référentiel moléculaire :

$$\left(R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol} \right)_{jk} = \langle \chi_j | \varphi_k^{ph} \rangle_{t=+\infty} \quad (1.42)$$

En utilisant les propriétés de ces matrices de rotation :

$$\left(R_{+\infty}^{mol \rightarrow ph} \right)_{jk} = \left(R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol \dagger} \right)_{jk} = \left(R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol} \right)_{kj}^* \quad (1.43)$$

on peut reformuler l'expression (1.40) comme :

$$T_{ji}^{orient} = \sum_k \sum_l \left(R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol} \right)_{kj}^* T_{kl} \left(R_{-\infty}^{ph \rightarrow mol} \right)_{li} \quad (1.44)$$

ou sous forme matricielle :

$$T^{orient} = R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol \dagger} T R_{-\infty}^{ph \rightarrow mol} \quad (1.45)$$

2.5.3 Calcul des matrices de rotation

Afin de calculer les éléments de matrice $\left(R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol} \right)_{kj}$, nous allons supposer que la partie angulaire des états photoniques φ_j^{ph} ainsi que les états moléculaires χ_k sont des harmoniques sphériques complexes $Y_{l_i}^{m_i}(\theta, \varphi)$.

La rotation permettant de passer du référentiel photonique au référentiel moléculaire à $t = +\infty$ peut être définie en utilisant les angles d'Euler (α, β, γ) qui, selon la figure 1.4, valent en convention (z, y, z) :

$$(\alpha, \beta, \gamma) = \left(\pi, -\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} - \phi \right) \quad (1.46)$$

Dans cette convention, la rotation des harmoniques sphériques $R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol}$ peut être définie à partir des matrices de rotation de Wigner $r_{mm'}^{(l)}(\beta)$:

$$\left(R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol} \right)_{mm'}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i\alpha m} r_{mm'}^{(l)}(\beta) e^{-i\gamma m'} \quad (1.47)$$

Les matrices de Wigner sont définies selon :

$$r_{mm'}^{(l)}(\beta) = (-)^{m-m'} \sqrt{(l+m)!(l-m)!(l+m')!(l-m')!} \sum_s (-)^s \frac{\left(\cos \frac{\beta}{2} \right)^{2l-m+m'-2s} \left(\sin \frac{\beta}{2} \right)^{2s+m-m'}}{(l-m-s)!(l+m'-s)!s!(s+m-m')!} \quad (1.48)$$

où s représente les nombres entiers satisfaisant la condition :

$$\max(0, m-m') \leq s \leq \min(l-m, l+m') \quad (1.49)$$

Les bornes sur s assurent l'existence des termes en factorielle.

Application au cas $l = 0$: Les états de moment angulaire nul étant invariants par rotation, on a nécessairement :

$$\left(R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol} \right)_{00}^{(0)} = 1 \quad (1.50)$$

Application au cas $l = 1$: En utilisant l'expression des éléments de matrice de rotation $r_{mm'}^{(l)}(\beta)$ (équation 1.48) et en notant que :

$$\begin{cases} \sin\frac{\beta}{2}\cos\frac{\beta}{2} = \frac{\sin\beta}{2} \\ \cos^2\frac{\beta}{2} - \sin^2\frac{\beta}{2} = \cos\beta \\ \cos^2\frac{\beta}{2} = \frac{1}{2}(1 + \cos\beta) \\ \sin^2\frac{\beta}{2} = \frac{1}{2}(1 - \cos\beta) \end{cases} \quad (1.51)$$

on obtient :

$$r_{mm'}^{(1)}(\beta) = \begin{matrix} & +1 & 0 & -1 \\ +1 & \left(\begin{array}{ccc} \frac{1}{2}(1 + \cos\beta) & -\frac{\sqrt{2}}{2}\sin\beta & \frac{1}{2}(1 - \cos\beta) \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\sin\beta & \cos\beta & -\frac{\sqrt{2}}{2}\sin\beta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos\beta) & \frac{\sqrt{2}}{2}\sin\beta & \frac{1}{2}(1 + \cos\beta) \end{array} \right) & & \\ 0 & & & \\ -1 & & & \end{matrix} \quad (1.52)$$

Notons que la base définie ici sera valable pour toutes les matrices de rotations que nous allons utiliser maintenant. Or pour $\beta = -\pi/2$ la matrice se simplifie largement :

$$r_{mm'}^{(1)}\left(-\frac{\pi}{2}\right) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (1.53)$$

si on ajoute les éléments de rotation en α et γ , on obtient :

$$\left(R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol}\right)_{mm'}^{(1)}\left(\pi, -\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} - \phi\right) = \begin{pmatrix} \frac{i}{2}e^{i\phi} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{i}{2}e^{-i\phi} \\ i\frac{\sqrt{2}}{2}e^{i\phi} & 0 & i\frac{\sqrt{2}}{2}e^{-i\phi} \\ \frac{i}{2}e^{i\phi} & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{i}{2}e^{-i\phi} \end{pmatrix} \quad (1.54)$$

Or les états moléculaires $|\chi_k^{mol}\rangle$ calculés pour $t = +\infty$ dans le repère tournant sont réels et peuvent être représentés par $|p_x^{mol}\rangle$, $|p_y^{mol}\rangle$ et $|p_z^{mol}\rangle$. On obtient les états moléculaires $|p_{-1}^{mol}\rangle$, $|p_0^{mol}\rangle$ et $|p_{+1}^{mol}\rangle$ en appliquant, comme pour les harmoniques sphériques, les relations bien connues :

$$\begin{cases} |p_{-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|p_x\rangle - i|p_y\rangle) \\ |p_{+1}\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}}(|p_x\rangle + i|p_y\rangle) \\ |p_0\rangle = |p_z\rangle \end{cases} \quad (1.55)$$

Ce qui revient à multiplier les vecteurs $|p_i^{mol}\rangle$, $i = x, y, z$, par la matrice de passage P tel que :

$$\begin{pmatrix} p_{+1} \\ p_0 \\ p_{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}_{mol} \begin{pmatrix} p_z \\ p_x \\ p_y \end{pmatrix}_{mol} \quad (1.56)$$

Enfin pour passer du référentiel moléculaire au référentiel photonique il suffit de multiplier la matrice P^* par la matrice $\left(R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol \dagger}\right)_{mm'}^{(1)}$, ce qui donne la matrice de passage :

$$\left(R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol}\right)^{(1)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}}\cos\phi & \sin\phi & -\frac{i}{\sqrt{2}}\cos\phi \\ \frac{i}{\sqrt{2}}\sin\phi & \cos\phi & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\phi \end{pmatrix} \quad (1.57)$$

Pour simplifier les éléments de cette matrice, nous avons utilisé les relations $\cos\phi = \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2}$ et $\sin\phi = \frac{e^{i\phi} - e^{-i\phi}}{2i}$.

Pour déterminer l'expression de la matrice de passage $\left(R_{-\infty}^{ph \rightarrow mol}\right)^{(1)}$ il suffit de reprendre l'expression de la matrice de passage qui vient d'être calculée (équation 1.57) et d'inverser le signe de tous les éléments faisant intervenir les états $|p_x\rangle$ et $|p_z\rangle$. En effet, on peut écrire pour le repère moléculaire tournant :

$$\begin{cases} x_{mol}^{+\infty} = -x_{mol}^{-\infty} \\ y_{mol}^{+\infty} = y_{mol}^{-\infty} \\ z_{mol}^{+\infty} = -z_{mol}^{-\infty} \end{cases} \quad (1.58)$$

il vient donc que :

$$\left(R_{-\infty}^{ph \rightarrow mol}\right)^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}}\cos\phi & -\sin\phi & \frac{i}{\sqrt{2}}\cos\phi \\ \frac{i}{\sqrt{2}}\sin\phi & \cos\phi & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\phi \end{pmatrix} \quad (1.59)$$

application au cas $l = 2$: On procède de la même façon que pour le cas $l = 1$, mais pour ne pas alourdir le manuscrit, nous ne détaillerons pas ce calcul.

2.5.4 Probabilités et sections efficaces entre états orientés

Connaissant les matrices de rotation entrantes et sortantes et les amplitudes de transitions calculées dans la base moléculaire, on obtient facilement selon (1.44) les expressions explicites des amplitudes de transition entre états orientés.

Dans le cas où l'état final a un moment angulaire nul, on a :

$$\begin{aligned} T^{orient} &= \left(R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol \dagger}\right)^{(0)} T \left(R_{-\infty}^{ph \rightarrow mol}\right)^{(1)} \\ &= 1(T_{p_z \rightarrow s} \ T_{p_x \rightarrow s} \ 0) \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}}\cos\phi & -\sin\phi & \frac{i}{\sqrt{2}}\cos\phi \\ \frac{i}{\sqrt{2}}\sin\phi & \cos\phi & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\phi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.60)$$

$$\begin{pmatrix} T_{p_{+1} \rightarrow s}^{orient} \\ T_{p_0 \rightarrow s}^{orient} \\ T_{p_{-1} \rightarrow s}^{orient} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}T_{p_z \rightarrow s} + \frac{i}{\sqrt{2}}\cos\phi T_{p_x \rightarrow s} \\ -\sin\phi T_{p_x \rightarrow s} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}T_{p_z \rightarrow s} + \frac{i}{\sqrt{2}}\cos\phi T_{p_x \rightarrow s} \end{pmatrix} \quad (1.61)$$

On remarque tout de suite que la considération d'états orientés détruit le symétrie azimutale en ϕ si bien qu'autant les amplitudes de transition que les sections efficaces différentielles :

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}^{orient}}{d\Omega}(v, \theta, \phi) = |T_{fi}^{orient}|^2 \quad (1.62)$$

dépendent explicitement de ϕ . Il en va de même des probabilités de transition qui s'obtiennent en remplaçant dans (1.60) la matrice T par la matrice A contenant les amplitudes du développement moléculaire en $t = +\infty$:

$$A_{i \rightarrow j} = a_{i \rightarrow j}(v, b; t = +\infty) \quad (1.63)$$

d'où :

$$P^{orient}(v, b) = \left(R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol \dagger} \right)^{(0)} A \left(R_{-\infty}^{ph \rightarrow mol} \right)^{(1)} \quad (1.64)$$

Soit :

$$\begin{cases} P_{p+1 \rightarrow s}^{orient}(v, b) = \frac{1}{\sqrt{2}} a_{p_z \rightarrow s} + \frac{i}{\sqrt{2}} \cos\phi a_{p_x \rightarrow s} \\ P_{p0 \rightarrow s}^{orient}(v, b) = -\sin\phi a_{p_x \rightarrow s} \\ P_{p-1 \rightarrow s}^{orient}(v, b) = -\frac{1}{\sqrt{2}} a_{p_z \rightarrow s} + \frac{i}{\sqrt{2}} \cos\phi a_{p_x \rightarrow s} \end{cases} \quad (1.65)$$

Les sections efficaces $\sigma_{i \rightarrow j}^{orient}$ s'obtiennent en intégrant les sections efficaces différentielles en θ et ϕ , ou de façon équivalente, par intégration des probabilités en b et ϕ :

$$\sigma_{i \rightarrow j}^{orient} = \int \frac{d\sigma_{i \rightarrow j}^{orient}}{d\Omega} \sin\theta d\theta d\varphi = \int P_{i \rightarrow j}^{orient} b db d\phi \quad (1.66)$$

Dans le cas où l'état final a un moment angulaire $l = 1$, on a :

$$\begin{aligned} T^{orient} &= \left(R_{+\infty}^{ph \rightarrow mol \dagger} \right)^{(1)} T \left(R_{-\infty}^{ph \rightarrow mol} \right)^{(1)} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{-i}{\sqrt{2}} \cos\phi & \frac{i}{\sqrt{2}} \sin\phi \\ 0 & \sin\phi & \cos\phi \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-i}{\sqrt{2}} \cos\phi & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{p_z \rightarrow z} & T_{p_x \rightarrow z} & 0 \\ T_{p_z \rightarrow x} & T_{p_x \rightarrow x} & 0 \\ 0 & 0 & T_{p_y \rightarrow y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \cos\phi & -\sin\phi & \frac{i}{\sqrt{2}} \cos\phi \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \sin\phi & \cos\phi & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\phi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.67)$$

Si bien que :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 T_{p_{+1} \rightarrow +1}^{orient} = -\frac{1}{2}T_{p_{z \rightarrow z}} - \frac{1}{2}\cos^2\phi T_{p_{x \rightarrow x}} + \frac{1}{2}\sin^2\phi T_{p_{y \rightarrow y}} + \frac{i}{2}\cos\phi(T_{p_{z \rightarrow x}} - T_{p_{x \rightarrow z}}) \\
 T_{p_{0 \rightarrow +1}}^{orient} = \frac{\sqrt{2}}{2}\sin\phi T_{p_{x \rightarrow z}} - i\frac{\sqrt{2}}{4}\sin 2\phi(T_{p_{x \rightarrow x}} + T_{p_{y \rightarrow y}}) \\
 T_{p_{-1} \rightarrow +1}^{orient} = \frac{1}{2}T_{p_{z \rightarrow z}} - \frac{1}{2}\cos^2\phi T_{p_{x \rightarrow x}} + \frac{1}{2}\sin^2\phi T_{p_{y \rightarrow y}} - \frac{i}{2}\cos\phi(T_{p_{z \rightarrow x}} + T_{p_{x \rightarrow z}}) \\
 T_{p_{+1} \rightarrow 0}^{orient} = \frac{\sqrt{2}}{2}\sin\phi T_{p_{z \rightarrow x}} + i\frac{\sqrt{2}}{4}\sin 2\phi(T_{p_{x \rightarrow x}} + T_{p_{y \rightarrow y}}) \\
 T_{p_{0 \rightarrow 0}}^{orient} = \cos^2\phi T_{p_{y \rightarrow y}} - \sin^2\phi T_{p_{x \rightarrow x}} \\
 T_{p_{-1} \rightarrow 0}^{orient} = i\frac{\sqrt{2}}{4}\sin 2\phi(T_{p_{x \rightarrow x}} + T_{p_{y \rightarrow y}}) - \frac{\sqrt{2}}{2}\sin\phi T_{p_{z \rightarrow x}} \\
 T_{p_{+1} \rightarrow -1}^{orient} = \frac{1}{2}T_{p_{z \rightarrow z}} - \frac{1}{2}\cos^2\phi T_{p_{x \rightarrow x}} + \frac{1}{2}\sin^2\phi T_{p_{y \rightarrow y}} + \frac{i}{2}\cos\phi(T_{p_{x \rightarrow z}} + T_{p_{z \rightarrow x}}) \\
 T_{p_{0 \rightarrow -1}}^{orient} = -\frac{\sqrt{2}}{2}\sin\phi T_{p_{x \rightarrow z}} - i\frac{\sqrt{2}}{4}\sin 2\phi(T_{p_{x \rightarrow x}} + T_{p_{y \rightarrow y}}) \\
 T_{p_{-1} \rightarrow -1}^{orient} = -\frac{1}{2}T_{p_{z \rightarrow z}} - \frac{1}{2}\cos^2\phi T_{p_{x \rightarrow x}} + \frac{1}{2}\sin^2\phi T_{p_{y \rightarrow y}} + \frac{i}{2}\cos\phi(T_{p_{x \rightarrow z}} - T_{p_{z \rightarrow x}})
 \end{array} \right. \quad (1.68)$$

Comme auparavant, les probabilités de transitions s'obtiennent en remplaçant dans (1.68) les amplitudes de transition moléculaires par les amplitudes $a_{i \rightarrow j}(v, b)$. Nous ne détaillerons pas plus avant, afin d'éviter toute lourdeur de présentation, l'obtention des amplitudes et probabilités dans le cas $l \geq 2$. Elles s'obtiennent en suivant la même procédure que dans le cas $l = 1$.

Chapitre 2

Approches expérimentales

La partie qui vient de s'achever présente des calculs très aboutis pour traiter les collisions ion-atome à basse énergie, et plus particulièrement pour décrire le processus d'échange de charge dans le système $\text{Na}^+ + \text{Rb}$. La précision de ces calculs et les diverses observables auxquelles ils donnent accès laisse aux expérimentateurs un grand nombre de possibilités pour tester, à l'aide de différentes mesures, les résultats théoriques.

La description de la capture électronique par le calcul MOCC semi-classique se résume à un ensemble de résultats constitué des sections efficaces absolues, relatives et différentielles. Ce sont donc ces observables que l'on tentera de mesurer expérimentalement. Néanmoins, la mesure expérimentale de ces grandeurs peut s'avérer difficile si l'on veut atteindre un degré de précision permettant de tester efficacement les calculs. La technique COLTRIMS (*COLD Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy*) a dans ce domaine constitué une avancée majeure. Cette technique, développée à la fin des années 1990 [21, 58, 59], vise à reconstruire la distribution des états finals lors de la capture électronique ainsi que les angles de diffusion du projectile, via une mesure de l'impulsion de recul communiquée à la cible. Elle permet de réaliser des expériences cinématiquement complètes avec une bonne résolution sur les angles de diffusion et les Q de réaction, et ce, pour une large gamme d'énergie de collision. La distribution statistique des états finaux de l'électron capturé donne alors accès aux sections efficaces relatives des différentes voies de sorties de la collision et permettent de tester les prédictions théoriques. D'autre part, les distributions en angle de diffusion du projectile peuvent être comparées aux sections efficaces différentielles théoriques pour les canaux observés. Dans la mise en œuvre de cette technique expérimentale, plusieurs éléments peuvent entrer en jeu et limiter la résolution attendue sur les observables que l'on souhaite mesurer. L'ensemble de l'information sur la dynamique de la collision est ici contenue dans l'impulsion de l'ion de recul. Si l'on considère que la cible est suffisamment froide pour que son impulsion initiale soit négligeable devant le transfert d'impulsion mis en jeu au cours de la collision, la mesure n'en sera que plus précise. Pour la technique COLTRIMS, la cible est usuellement fournie par un jet supersonique. Bien que très froide ($\sim 1\text{K}$), elle reste un facteur limitant pour la mesure de l'impulsion de l'ion de recul. Dès le début des années 2000, plusieurs groupes se sont lancés dans des expériences influencées par le principe COLTRIMS, mais où les atomes cibles étaient obtenus par refroidissement laser et piégeage au sein d'un piège magnéto-optique (MOT pour magneto-optical trap). Cette technique que l'on appela plus tard la technique MOTRIMS (pour magneto-optical trap recoil ion momentum spectroscopy) a été développée simultanément en 2001 par trois groupes, l'un au Danemark [60], un second aux Pays Bas [61], et le dernier à Kansas State University [62].

La température des cibles produites par le MOT peut être, comme nous le montrerons dans la suite, inférieure à $200 \mu\text{K}$. Cela permet de s'affranchir de la limitation en résolution sur l'impulsion de recul due à l'agitation thermique des atomes cibles. Dans le cas de la simple capture électronique dans les collisions à basse énergie entre des cibles de Rb et des projectiles de Na^+ , les partenaires de la collision ont des masses relativement élevées et il n'y a pas de répulsion coulombienne en voie de sortie (le projectile est neutre après l'échange de charge). On s'attend donc à des angles de diffusion très faibles, dont la mesure nécessite une excellente résolution sur l'impulsion de recul. Pour un tel système, l'avantage de la technique MOTRIMS est évident. Au-delà de cette avancée sur la précision de la mesure, viennent s'ajouter d'autres avantages liés à la technique de production de cibles froides dans un MOT. Par exemple la technique COLTRIMS restait limitée à l'étude de collisions avec des cibles atomiques de gaz rares. Il est maintenant possible, à l'aide d'un MOT, de piéger des atomes de la famille des alcalins, des alcalino-terreux et également des gaz rares. Enfin, et c'est l'une des motivations principales de ce travail, il devient possible de produire des cibles préparées, soit dans des états excités, orientés ou même alignés en utilisant les faisceaux lasers du piège magnéto-optique. Le chapitre qui va suivre est consacré, à la présentation de cette technique expérimentale résultant du couplage entre un spectromètre d'impulsion d'ion de recul et d'un piège magnéto-optique. Nous y détaillerons le dispositif conçu à Caen en vue d'étudier les collisions ion-atome à basse énergie pour le système $\text{Na}^+ + {}^{87}\text{Rb}$ pour différents états de la cible.

1 La technique MOTRIMS

1.1 La spectroscopie d'impulsion d'ion de recul (RIMS)

La première section de ce chapitre a pour objet de décrire les principes de base de la spectroscopie d'impulsion d'ions de recul, et de son application à l'étude de l'échange de charge dans les collisions ion-atome.

1.1.1 Détermination complète de la cinématique de la collision

Avec cette méthode, il est possible d'accéder à l'intégralité de la cinématique de la collision. Pour s'en rendre compte il suffit d'écrire l'équation de conservation de l'impulsion au cours de la collision :

$$\vec{P}_P^i + \vec{P}_R^i = \vec{P}_P^f + \vec{P}_R^f \quad (2.1)$$

où l'indice i fait référence à la voie d'entrée de la collision et l'indice f à la voie de sortie de la collision. L'indice P est relatif aux impulsions du projectile et l'indice R à celles de l'ion de recul. La notation \vec{P}_R^i n'est pas rigoureuse car dans l'état initial, la cible est neutre et n'est donc pas encore qualifiable d'ion de recul, néanmoins par souci de simplicité nous garderons cette notation. Dans un premier temps nous pouvons considérer que la cible est au repos, ce qui est une hypothèse raisonnable aux vues de la méthode de production employée et qui sera exposée par la suite. On a donc $P_R^i = 0$. Lors du processus de capture électronique, la transition de l'électron actif de la cible vers le projectile implique également un transfert de masse, celle des électrons. On exprimera donc les masses du projectile et de l'ion de recul après la collision en fonction de leurs masses initiales de la manière suivante :

$$\begin{cases} m_P^f = m_P^i + r \\ m_R^f = m_R^i - r \end{cases} \quad (2.2)$$

On notera que la masse de l'électron vaut 1, et r est le nombre d'électrons capturés (nous utiliserons les unités atomiques tout au long de ce chapitre). On peut donc reformuler l'équation (2.1) :

$$m_P^i \vec{v}_P^i = m_P^f \vec{v}_P^f + m_R^f \vec{v}_R^f \quad (2.3)$$

où \vec{v} est la vitesse du projectile ou de l'ion de recul, avant ou après la collision en respect des indices utilisés.

De la même façon, il est possible d'écrire la conservation de l'énergie totale du système :

$$T_P^i + T_R^i + Q = T_P^f + T_R^f \quad (2.4)$$

où T est l'énergie cinétique relative au projectile ou à la cible, avant ou après la collision, en accord avec les indices qui lui sont attribués et Q la différence d'énergie potentielle de l'électron entre l'état final, sur le projectile, et l'état initial, sur la cible. On peut d'ores et déjà noter que dans le cas où : $Q < 0$, la réaction est dite endothermique, ce qui signifie que l'état final de l'électron sur le projectile est moins lié que son état initial sur la cible. Dans ce cas, cela se traduit par une perte d'énergie cinétique du système au profit d'une énergie potentielle plus grande. Si l'on considère le cas contraire, où l'on a $Q > 0$, la réaction est qualifiée d'exothermique et le système gagne en énergie cinétique. Lors de collisions homonucléaires, il est possible d'avoir $Q = 0$, si l'électron se trouve sur le même état sur la cible en voie d'entrée que sur le projectile en voie de sortie. Ces réactions sont dites résonantes et l'énergie cinétique du système n'est alors pas modifiée.

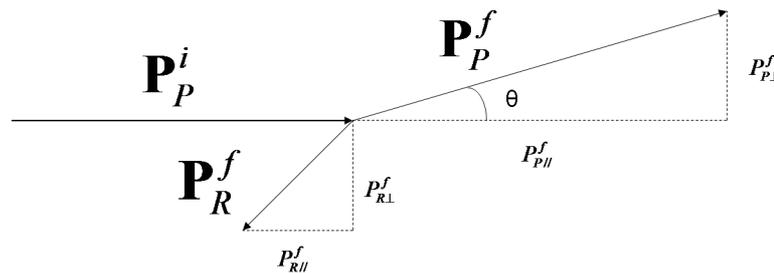


FIGURE 2.1: Représentation schématique des vecteurs d'impulsion du projectile et de la cible en voie d'entrée et de sortie de la collision. Cette représentation dans le plan de collision montre également la projection des impulsions sur l'axe parallèle et l'axe transverse à l'axe d'incidence du projectile.

La figure 2.1 représente schématiquement les différentes impulsions liées aux particules au cours de la collision. Dans le plan de collision défini ici, il est possible de projeter les impulsions sur l'axe d'incidence du projectile ainsi que sur l'axe transverse à ce dernier. La conservation de l'impulsion après projection s'écrit :

$$\begin{cases} 0 = P_{P\perp}^f + P_{R\perp}^f \\ P_{P//}^i = P_{P//}^f + P_{R//}^f \end{cases} \quad (2.5)$$

où les impulsions P_{\perp} sont les composantes des impulsions obtenues par projection sur l'axe transverse à l'axe d'incidence du projectile et où les impulsions $P_{//}$ sont les composantes des impulsions colinéaires à l'impulsion initiale du projectile. Le choix du repère mène donc à $P_{P\perp}^i = 0$. Les deux composantes de l'impulsion de l'ion de recul vont pouvoir être traitées séparément et nous apporter l'information nécessaire à la reconstruction des observables pertinentes de la collision.

Composante longitudinale de l'impulsion de l'ion de recul. Les équations (2.4) et (2.5) permettent de faire la correspondance entre les impulsions et le Q de réaction. Cette dernière observable permet de quantifier l'inélasticité de la collisions. Dans le cas des collisions ion-atome étudiées lors de ce travail, les faibles angles de diffusion du projectile mis en jeu permettent d'exprimer le Q de réaction en fonction de la composante longitudinale de l'impulsion de l'ion de recul [63]. On a alors :

$$Q = -v_P^i P_{R//}^f - \frac{1}{2} r v_P^{i2} \quad (2.6)$$

Il est possible à ce stade de calculer l'expression de la résolution sur Q en fonction de l'impulsion de l'ion de recul mesurée expérimentalement et de la vitesse du projectile :

$$\Delta Q = \sqrt{\left((P_{R//}^f + r v_P^i) \Delta v_P^i \right)^2 + \left(v_P^i \Delta P_{R//}^f \right)^2} \quad (2.7)$$

Afin de simplifier cette expression, on peut la mettre sous la forme suivante :

$$\Delta Q = \sqrt{\left(\left(\frac{P_{R//}^f}{m_P v_P^i} + \frac{r}{m_P} \right) \Delta T_P^i \right)^2 + \left(v_P^i \Delta P_{R//}^f \right)^2} \quad (2.8)$$

Dans l'équation (2.6), le terme $\frac{1}{2} r v_P^{i2}$ peut être négligé devant le Q de réaction. En effet, les énergies auxquelles ont été réalisées nos expériences mènent à des vitesses de projectile telles que $v_P^i < 0.01 \text{u.a.}$ donc $\frac{1}{2} r v_P^{i2} < 10^{-4} \text{u.a.}$ à comparer à des Q de réaction dont l'ordre de grandeur est du dixième d'unité atomique. En faisant l'approximation que $Q \approx -v_P^i P_{R//}^f$, il vient que la résolution sur le Q peut se mettre sous la forme :

$$\Delta Q = \sqrt{\left(\left(\frac{-Q}{2T_P^i} + \frac{r}{m_P} \right) \Delta T_P^i \right)^2 + \left(Q \frac{\Delta P_{R//}^f}{P_{R//}^f} \right)^2} \quad (2.9)$$

On peut également négliger le rapport r/m_P dans le cas des projectiles et des cibles utilisés ici. De même, la valeur de $Q/2T_P^i$ est ici inférieure à 1.10^{-4} . Ces deux rapports peuvent donc être négligés devant la résolution expérimentale $\Delta P_{R//}^f / P_{R//}^f$ qui, dans le meilleur des cas, est de l'ordre de 10^{-2} .

On peut donc raisonnablement considérer que la résolution sur le Q de réaction ne dépend que de la résolution sur la mesure de l'impulsion longitudinale de l'ion de recul :

$$\Delta Q = \left| Q \frac{\Delta P_{R//}^f}{P_{R//}^f} \right| \quad (2.10)$$

Composante transverse de l'impulsion de l'ion de recul. En se plaçant toujours dans le cadre de l'étude de la capture électronique, on peut exprimer la correspondance entre les impulsions transverses finales du projectile et de l'ion de recul par :

$$P_{P\perp}^f = -P_{R\perp}^f \quad (2.11)$$

La mesure de l'impulsion transverse de l'ion de recul mène donc à la connaissance de l'impulsion transverse du projectile en voie de sortie. Cette impulsion transverse du projectile est directement liée à l'angle de diffusion de celui-ci par la relation :

$$P_{P\perp}^f = P_{P//}^f \tan\theta \quad (2.12)$$

Comme dans le cas de l'impulsion longitudinale, il est correct de dire que le transfert d'impulsion au cours de la collision est faible par rapport aux impulsions initiales et finales du projectile, ce qui permet d'écrire :

$$P_{P\perp}^f \approx P_{P//}^i \tan\theta = m_P v_P^i \tan\theta \quad (2.13)$$

Dans le cas de la capture électronique pour le système $\text{Na}^+ + \text{Rb}$ aux énergies de l'ordre du keV, l'absence de répulsion coulombienne lors de la collision ainsi que les masses élevées des partenaires de la collision conduisent à des angles de diffusion très petits, de l'ordre du mrad, on peut alors considérer que $\tan\theta \approx \theta$ et donc :

$$P_{P\perp}^f \approx m_P v_P^i \theta \quad (2.14)$$

La mesure de l'impulsion transverse de l'ion de recul pour des collisions à une énergie bien définie permet d'accéder aisément à l'angle de diffusion du projectile :

$$\theta = -\frac{P_{R\perp}^f}{m_P v_P^i} \quad (2.15)$$

Comme pour le Q de réaction, il est intéressant de connaître l'expression de la résolution sur θ :

$$\Delta\theta = \left| \theta \frac{\Delta P_{R\perp}^f}{P_{R\perp}^f} \right| \quad (2.16)$$

Le calcul rigoureux de cette résolution expérimentale suit la même logique que celui effectué au paragraphe précédent. La résolution sur l'angle de diffusion du projectile est alors uniquement limitée par la résolution sur la mesure de l'impulsion transverse de l'ion de recul.

1.1.2 Conclusion

Pour l'étude de la simple capture électronique aux énergies considérées ici, la spectroscopie d'impulsion d'ion de recul, permet de reconstruire les Q de réaction associés à chaque canal de collision via la mesure de la composante longitudinale de l'impulsion de l'ion de recul. La mesure de l'impulsion transverse de l'ion de recul quant à elle permet de mesurer l'angle de diffusion du projectile en voie de sortie de la collision (équation (2.15)). Nous avons également mis en évidence que les résolutions liées à ces observables (θ, Q) ne dépendent que des résolutions expérimentales sur les composantes de l'impulsion de l'ion de recul (équations (2.10) (2.16)). L'ensemble du dispositif MOTRIMS présenté dans la suite a donc été conçu dans le but d'obtenir la meilleure résolution possible sur la mesure de l'impulsion de l'ion de recul.

1.2 Production d'une cible froide dans un piège magnéto-optique (MOT)

C'est en 1987 que Raab *et al.* [23] réalisa pour la première fois le piégeage tridimensionnel d'atomes à l'aide de faisceaux laser. Cette technique de piégeage atomique s'est rapidement développée et constitue aujourd'hui la base de nombreux sujets de recherche, tels que l'étude des condensats de Bose-Einstein, la photo-association, ou bien encore l'informatique quantique. Ce n'est qu'à la fin des années 1990 que cette technique fût pour la première fois exploitée dans le but de fournir une cible atomique pour l'étude de collisions [64].

Depuis le début des années 2000, le piégeage magnéto-optique d'atomes associé à la spectroscopie d'impulsion d'ion de recul permet l'étude des collisions ion-atome en proposant de nouvelles espèces atomiques pour cible, telles que les alcalins et les alcalino-terreux. Il permet également de préparer ces cibles à l'aide de lasers et fournit une opportunité de mesurer l'impulsion des ions de recul avec une résolution accrue par rapport à la technique COLTRIMS.

Après avoir présenté le principe de la spectroscopie d'impulsion d'ion de recul, c'est maintenant la production de la cible froide et le principe du MOT qui va être décrit.

Les techniques de refroidissement et de piégeage par laser au sein d'un MOT sont bien détaillées dans de nombreux ouvrages [65, 23]. Nous ne donnerons ici au lecteur que les principes de base.

1.2.1 Le refroidissement laser

La conservation de l'énergie et de l'impulsion impose que lorsqu'un atome absorbe un photon, l'atome acquiert également l'impulsion initiale de ce photon. C'est ce transfert d'impulsion du photon à l'atome qui va permettre d'exercer une force de freinage sur l'atome. Pour que le processus d'absorption soit efficace, il faut un rayonnement laser dont la fréquence est proche de celle d'une transition électronique. En effet, l'absorption d'un grand nombre de photons provenant d'une source laser conduit à un transfert d'impulsion dans la direction du laser, qui n'est pas compensée par celui, isotrope, résultant de l'émission spontanée. Dans le cas du piégeage du rubidium 87, la fréquence laser devra être résonante avec la transition de l'état fondamental $5^2S_{1/2}$ vers l'état excité $5^2P_{3/2}$. Le terme *refroidissement*, qui fait intervenir la notion de température, d'atomes est liée à la diminution de la quantité de mouvement des atomes. Au niveau individuel, il n'est pas juste de parler de température, cette grandeur thermodynamique apparaît lorsque le nombre de particules mis en jeu est élevé. Néanmoins dans un nuage d'atomes

produit par un MOT, cette terminologie est acceptable car le nombre de particules dépasse le million.

Supposons le cas d'atomes ne pouvant se déplacer que selon une dimension. Afin de les refroidir, il faut que la quantité de mouvement absorbée par l'atome soit opposée à la quantité de mouvement initiale de l'atome. Pour cela, on applique deux faisceaux lasers contra-propageant. Or le déplacement de l'atome à une vitesse v fait que, par effet Doppler, l'atome va voir la fréquence du laser qui se propage dans la direction opposée à sa vitesse augmentée et celle du laser qui se propage dans le même sens que lui diminuée. La fréquence apparente perçue par l'atome est donnée par :

$$\nu_{\text{atome}} = \nu_l \left(1 - \frac{v}{c}\right) \quad (2.17)$$

où c est la vitesse de la lumière et ν_{atome} est la fréquence ressentie par l'atome qui se déplace à la vitesse v , pour un laser dont la fréquence est ν_l . Dans cette convention, on a $v > 0$ quand l'atome se déplace dans le même sens que le laser.

Pour que l'atome absorbe préférentiellement un photon issu du laser contra-propageant, il faut que la fréquence de ce dernier soit inférieure à la fréquence associée à la transition électronique. Ce petit décalage de fréquence est noté δ : il correspond au décalage Doppler et est appelé *detuning*. Ce décalage est l'un des paramètres important d'un MOT qui influe notamment sur la quantité d'atomes piégés et la température du nuage. Les meilleures conditions de refroidissement sont généralement obtenues avec des décalages δ de l'ordre de deux à trois fois la largeur naturelle de la raie de transition. La force résultante exercée par deux faisceaux lasers contra-propageant de *detuning* δ sur un atome en fonction de sa vitesse est représentée sur la figure 2.2. L'absorption de photons d'impulsions opposées au sens de déplacement de l'atome permet de ralentir ce dernier.

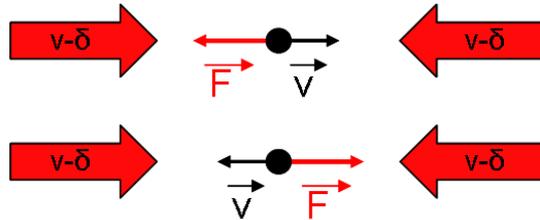


FIGURE 2.2: Représentation schématique de la force résultante de deux faisceaux laser contra-propageant de fréquence $\nu - \delta$ sur un atome en fonction de sa vitesse v . La fréquence perçue par l'atome est ν .

En généralisant ce principe de refroidissement aux trois directions orthogonales de l'espace il est possible de créer des *molasses* optiques très froides dont la température est de l'ordre de quelques dizaines de μK . Néanmoins à ce stade, les atomes sont certes ralentis mais ne sont pas encore piégés. Pour cela il faut un potentiel attractif dans une zone de l'espace permettant de les confiner. Nous allons maintenant décrire l'étape permettant de créer ce confinement.

1.2.2 Le piégeage laser

Le potentiel attractif est créé à l'aide d'un gradient de champ magnétique inhomogène, produit par une paire de bobines en configuration anti-Helmholtz et par la polarisation circulaire

des six faisceaux lasers.

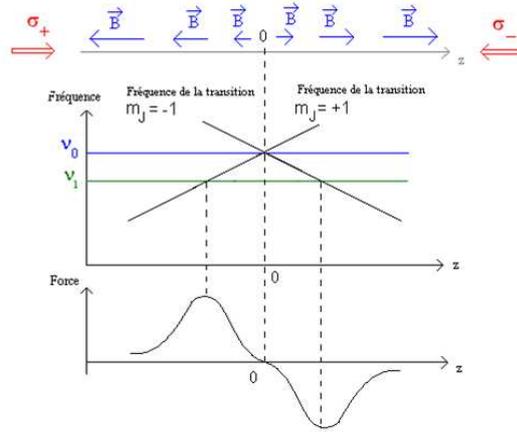


FIGURE 2.3: Représentation de l’effet Zeeman appliqué aux atomes en fonction de leurs positions dans le MOT.

La figure 2.3 expose l’effet du champ magnétique sur les atomes. A une dimension, dès qu’un atome s’écarte du centre du piège où le champ est nul, il subit l’effet du champ magnétique. Le champ magnétique est d’autant plus intense que l’atome s’éloigne du centre du piège, il est également de sens opposé de part et d’autre de ce centre. La conséquence de ce champ magnétique est une levée de dégénérescence des sous niveaux Zeeman ($m_J = 0, \pm 1$ dans cet exemple) dont les écarts seront dépendants de la position de l’atome dans le piège. La fréquence laser, ν_l , légèrement décalée vers le rouge est représentée sur le graphique 2.3 donnant la fréquence des transitions atomiques en fonction de la position de l’atome. On voit que, dans cet exemple, la fréquence laser entre en résonance avec la transition σ^+ ($\Delta m_J = +1$) lorsque les atomes s’éloignent du centre vers les z négatifs et avec la transition σ^- ($\Delta m_J = -1$) lorsque les atomes s’éloignent vers les z positifs. En imposant une polarisation circulaire adéquate aux faisceaux lasers, on va donc privilégier l’interaction des atomes avec le faisceau laser orienté dans la bonne direction et exercer une force qui cette fois permettra de les confiner au centre du piège. Sur la figure 2.3, le laser arrivant par la droite est polarisé de manière à ne conduire qu’à des transitions σ^- , tandis que celui venant de la gauche ne conduit qu’à des transition σ^+ . On généralise ensuite ce principe de confinement aux trois dimensions de l’espace. La figure 2.4 représente schématiquement les trois paires de faisceaux lasers contra-propageant polarisés et le champ magnétique créé par la paire de bobines.

1.3 Piégeage du ^{87}Rb

Dans les expériences de collisions que nous avons réalisées, la cible est un nuage d’atomes froids de ^{87}Rb . Dans cette partie, nous allons voir comment, en pratique, se fait le piégeage spécifique de ces atomes. Précédemment, on a décrit comment utiliser des faisceaux lasers afin d’exercer une force sur des atomes en utilisant un grand nombre de cycle d’absorption/émission de photons par ces atomes. Dans le cas idéal, la transition électronique utilisée pour le piégeage est cyclique, c’est-à-dire que la désexcitation des atomes ayant absorbé un photon ne peut conduire qu’à l’état initial. Pour les atomes de ^{87}Rb , l’état fondamental est le $5^2S_{1/2}$, dont le

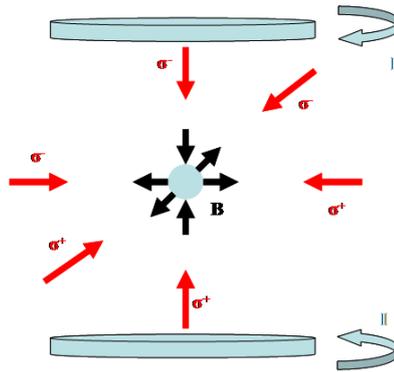


FIGURE 2.4: Représentation schématique du MOT avec la paire de bobines en configuration anti-Helmholtz qui produit le gradient de champ magnétique nécessaire au piégeage et les six faisceaux lasers polarisés circulairement.

moment angulaire qui vaut $J = 1/2$ se couple au moment angulaire nucléaire $I = 3/2$ pour donner naissance à des sous niveaux dont le moment angulaire total réel est défini par un entier F tel que $|J - I| \leq F \leq |J + I|$. Pour l'état fondamental, on a donc deux sous niveaux, celui de plus basse énergie avec $F = 1$ et celui de plus haute énergie $F = 2$. D'autre part, le niveau excité utilisé pour le piégeage de ces atomes de rubidium est le niveau atomique $5^2P_{3/2}$, qui par le même principe se divise en quatre sous niveaux avec $F = 0, 1, 2, 3$. La structure hyperfine de ces états du Rb est représentée sur la figure 2.5.

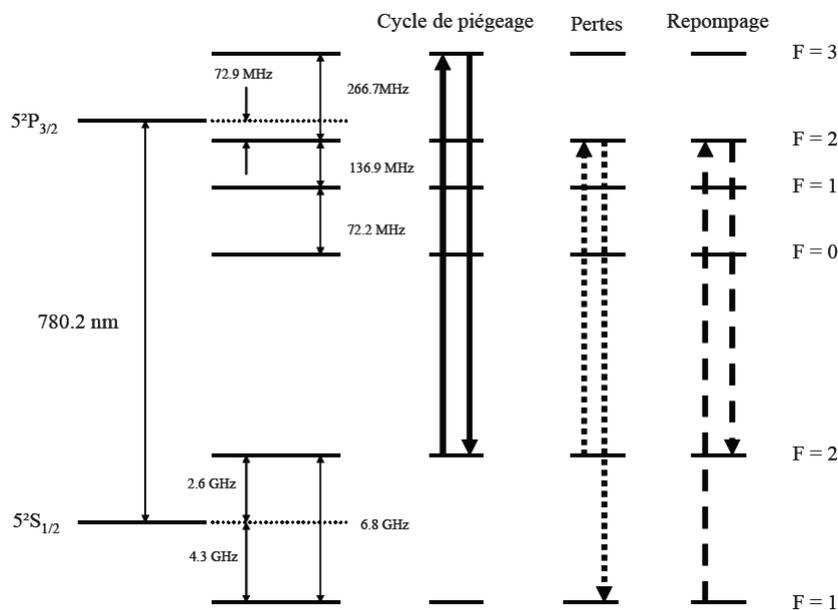


FIGURE 2.5: Structure hyperfine du niveau fondamental et du niveau excité du ^{87}Rb utilisés pour le piégeage magnéto-optique.

Afin que le piégeage soit le plus efficace possible, il est judicieux de choisir la transition électronique dont la force d'oscillateur est la plus élevée. En effet, cela permet d'avoir une pro-

tabilité d'absorption/émission plus grande, et donc d'agir de façon plus efficace sur les atomes. Cette transition, qui définit notre cycle de piégeage, est celle qui va du niveau fondamental avec $F = 2$ vers le niveau excité $F' = 3$. Malheureusement, la proximité en énergie d'un même groupe de sous niveaux, ainsi que la largeur spectrale du laser font que des transitions accidentelles vers le niveau excité $F' = 2$ peuvent arriver. Dans ce cas, en tenant compte des forces d'oscillateurs correspondantes aux transitions de ce niveau vers les sous niveaux de l'état fondamental pour $F = 1, 2$, on s'aperçoit que la probabilité de décroître vers le niveau $F = 1$ n'est pas négligeable. Les atomes qui vont transiter vers l'état fondamental de moment angulaire total $F = 1$ vont alors être perdus pour le piégeage magnéto-optique car la fréquence laser ne sera pas accordée pour qu'ils puissent encore absorber des photons. Pour parer à ce problème, il est nécessaire d'ajouter un faisceau laser accordé avec la transition $5^2S_{1/2}(F = 1)$ vers $5^2P_{3/2}(F' = 2)$ (figure 2.5) qui permettra de réinjecter les atomes *perdus* dans le cycle de piégeage. Les transitions associées au cycle de piégeage, aux pertes et au repompage des atomes de Rb sont représentées respectivement par des flèches pleines, des flèches en petits tirets et des flèches en long tirets sur la figure 2.5.

1.4 Le couplage du spectromètre d'impulsion d'ion de recul et du piège magnéto-optique

Les spectromètres d'impulsion d'ion de recul sont basés sur un principe très simple. Lorsqu'un ion projectile capture un ou plusieurs électrons à un atome cible, la cible ionisée (l'ion de recul) est extraite de la zone de collision par un champ électrique, et est collectée sur un détecteur à localisation. Grâce aux mesures conjointes de la position de l'ion de recul sur le détecteur et de son temps de vol, les trois composantes de son vecteur impulsion après la collision sont déterminées. L'instant de la collision est généralement déduit du temps de détection du projectile diffusé. Le champ électrique d'extraction est ici choisi selon la gamme d'impulsion à mesurer, de sorte à assurer une efficacité de détection en angle solide de 4π stéradians. Il est généralement de l'ordre de 1 V/cm dans le cas des collisions ion-atome, et est généré à l'aide d'un empilement d'électrodes autour de la zone de collision (figure 2.6).

Parmi les difficultés inhérentes au couplage d'un MOT à un spectromètre d'ions de recul, on trouve tout d'abord le problème du passage des faisceaux lasers. Ce passage, qui nécessite des ouvertures dans l'empilement d'électrodes a pour conséquence de briser la symétrie cylindrique du champ d'extraction, ce qui peut potentiellement dégrader la résolution sur la mesure de l'impulsion de recul. Ce point doit être étudié avec soin, à l'aide de simulations des trajectoires des ions de recul. Le champ magnétique de piégeage peut également poser problème. En effet, ce champ de piégeage inhomogène affecte la trajectoire des ions de recul (qui ont de faibles énergies), et dégrade également la résolution sur la mesure de l'impulsion de recul. Une solution consiste alors à alterner de façon cyclique une période champ *on* durant quelques millisecondes, afin de piéger les atomes, puis une période champ *off*, durant le temps de la prise de données. Cela demande une commutation rapide, difficile à mettre en œuvre compte tenu de la forte inductance des bobines et du courant qui les parcourt. Enfin, deux géométries d'extraction peuvent être choisies. On peut, comme cela a été fait dans un travail antérieur [66], extraire les ions dans une direction quasi parallèle au faisceau projectile. La mesure de la composante longitudinale de l'impulsion, qui donne accès au Q de réaction, est alors donnée par le temps de vol. C'est sur la mesure du temps de vol, que la meilleure résolution est attendue et l'avantage est donc ici de bénéficier de la meilleure résolution possible sur la mesure du Q de réaction. En

contrepartie, de nombreux projectiles du faisceau primaire, même s'il est bien collimaté, peuvent être diffusés sur le détecteur d'ions de recul et causer une source de bruit de fond importante. Ce problème est inexistant si les ions de recul sont extraits dans une direction perpendiculaire au faisceau projectile, tel que sur la figure 2.6. Dans ce cas, une bonne résolution sur les trois composantes de l'impulsion de recul demande d'une part, une bonne résolution spatiale du détecteur d'ions de recul, et d'autre part, un système de commutation rapide du champ magnétique. Comme nous le verrons dans la suite, c'est cette solution qui a été choisie pour le dispositif développé à Caen. Elle donne accès aux observables θ et Q avec une bonne résolution et un très bon rapport *signal/bruit*.

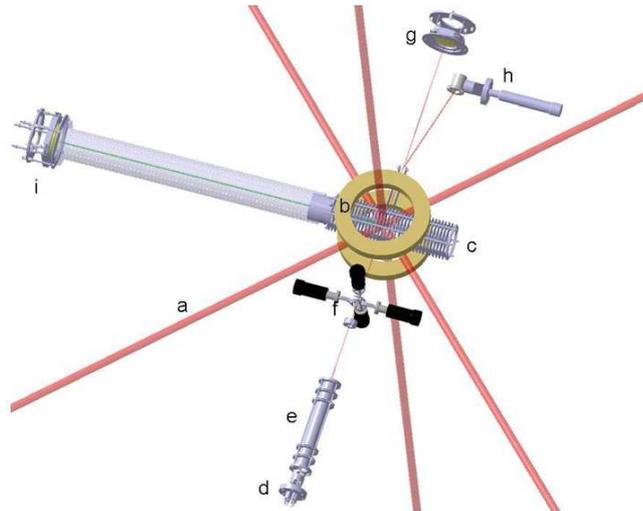


FIGURE 2.6: Représentation schématique de l'expérience LPC-MOT. Le MOT constitué des six faisceaux laser (a) et des bobines (b) produit une cible froide au centre du spectromètre (c). Le faisceau projectile est produit par une source thermoionique (d) mis en forme et collimaté par des lentilles électrostatiques (e) et deux paires de fentes (f). A la sortie de la chambre de collision, le faisceau est analysé en charge par un déflecteur électrostatique. Les ions primaires sont défléchis vers une cage de Faraday (h) et les projectiles neutralisés sont détectés par un détecteur sensible en position (g). Les ions de recul sont quant-à-eux détectés par un second détecteur sensible en position (i).

1.5 Apport de la technique MOTRIMS : Traitement de la cible dans des états excités

1.5.1 Mesure du rapport des sections efficaces sur cible excitée ou dans l'état fondamental

Comme nous l'avons évoqué en introduction, l'utilisation d'un piège magnéto optique pour produire la cible atomique présente l'avantage de pouvoir disposer d'une cible excitée ou dans son état fondamental. Il est également possible, au cours d'une même expérience, de mesurer le rapport entre la section efficace de capture sur cible excitée et sur cible dans son état fondamental. Nous donnons ici le principe de cette mesure.

Cette mesure repose sur la possibilité de commuter rapidement les lasers de piégeage ou tout autre laser d'excitation, de sorte à disposer d'un nuage cible constitué soit d'atomes uni-

quement dans leur état fondamental, soit d'un mélange (état fondamental - états excités). Si la commutation des lasers se fait à une fréquence de l'ordre de 10 à 100 kHz, on est dans une situation où la relaxation des états excités est très rapide (quelques dizaines de nanosecondes) devant la durée du cycle des lasers. De par la très faible température de la cible, la durée du cycle *on-off* des lasers d'excitation reste cependant trop courte pour que le nombre d'atomes cible présents dans la zone de collision ait le temps de changer. On a donc, au cours de ce cycle, une modification de la fraction excitée de la cible, mais pas de changement de sa densité.

S'il est possible de séparer et d'identifier, via le spectre en Q de réaction, les voies de capture associées à une transition à partir de la cible dans un état i donné, on peut alors calculer le nombre d'événements A_i correspondant à une capture à partir de cet état de la cible. Les sections efficaces associées sont notées σ_i et les populations d'atomes de l'état initial, n_i . Dans notre cas, l'indice i fera référence à l'état fondamental $5s$ et l'état excité $5p$ du Rb que l'on notera simplement s et p . On peut donc poser :

$$A_s = \alpha \sigma_s n_s \quad (2.18)$$

$$A_p = \alpha \sigma_p n_p \quad (2.19)$$

où la constante α est équivalente à un facteur de normalisation permettant de s'affranchir des conditions expérimentales telles que le temps d'acquisition et l'efficacité du dispositif.

Lorsque les lasers sont éteints ou allumés et que donc la cible est constituée de Rb($5s$) ou d'un mélange de Rb($5s,5p$), les équations (2.18) et (2.19) restent valables à condition de tenir compte de la variation de population relative des atomes dans les états s et p . On peut alors écrire :

$$\Delta A_s = \alpha \sigma_s \Delta n_s \quad (2.20)$$

$$\Delta A_p = \alpha \sigma_p \Delta n_p \quad (2.21)$$

$$\Delta n_s + \Delta n_p = 0 \quad (2.22)$$

où les Δn_i représentent la variation de population n_i en fonction de l'état des lasers. En faisant le rapport entre les équations (2.21) et (2.20), on obtient :

$$\frac{\Delta A_p}{\Delta A_s} = \frac{\sigma_p}{\sigma_s} \frac{\Delta n_p}{\Delta n_s} = -\frac{\sigma_p}{\sigma_s} \quad (2.23)$$

On peut donc déterminer les sections efficaces de capture électronique à partir de l'état p à l'aide de celles mesurées depuis l'état s .

Cette technique peut se généraliser pour obtenir les sections efficaces de capture électronique à partir de n'importe quel état initial toujours sous condition que le dispositif expérimental soit apte à résoudre les contributions issues des différents états initiaux i pour les distributions en Q de réaction. De façon générale, on pourra écrire :

$$\frac{\sigma_k}{\sigma_1} = -\frac{\Delta A_k}{\sum_{i=1}^{k-1} \Delta A_i \frac{\sigma_1}{\sigma_i}} \quad (2.24)$$

Ainsi, Shah *et al.* [67] ont mesuré les sections efficaces relatives de capture pour des collisions $\text{Na}^+ + \text{Rb}(4d)$ à une énergie de 7 keV.

1.5.2 Mesure de la fraction excitée

La méthode permettant de remonter aux sections efficaces relatives pour les différents états initiaux de la cible apporte également l'opportunité de mesurer la fraction d'atomes du nuage dans l'état excité. En conservant les notations qui viennent d'être utilisées, on peut donner l'expression de cette fraction excitée sous la forme :

$$f = \frac{n_p}{n_s + n_p} = \frac{A_p/\sigma_p}{A_s/\sigma_s + A_p/\sigma_p} = \frac{A_p}{A_s\sigma_p/\sigma_s + A_p} \quad (2.25)$$

Cette approche a été utilisée pas Shah *et al.* [67, 68] pour mesurer la fraction excitée d'un nuage d'atomes froids de rubidium, en fonction de différents paramètres intrinsèques au piège magnéto-optique. Ces mesures visaient à tester des modèles théoriques simples, d'atomes à deux niveaux, pour lesquels la fraction excitée précédente est donnée par :

$$f = \frac{I/I_s}{1 + 2I/I_s + (2\delta/\Gamma)^2} \quad (2.26)$$

où I est l'intensité totale des six faisceaux lasers, Γ la largeur naturelle de la bande de transition optique, δ le décalage fréquentiel du laser par rapport à la résonance et I_s l'intensité de saturation donné par :

$$I_s = \frac{2\pi h c \Gamma}{3\lambda^3} \quad (2.27)$$

où h est la constante de Planck, c la vitesse de la lumière et λ la longueur d'onde de la transition optique.

Lors du travail présenté ici, la fraction excitée a également été mesurée [69].

2 Le dispositif LPC-MOT

Le laboratoire de physique corpusculaire de Caen (LPC CAEN), en collaboration avec le centre de recherche sur les ions, la matière et la photonique (CIMAP), a entrepris en 2004 un projet de recherche sur les collisions entre ions à basses énergies et atomes froids. Ce projet a donné le jour au dispositif LPC-MOT, qui couple un piège magnéto-optique à un spectromètre d'impulsions d'ions de reculs.

Le premier objectif de cette étude est la résolution de structures très fines en angle de diffusion du projectile pour des collisions $\text{Na}^+ + {}^{87}\text{Rb}$. Être sensible à de telles structures est un point important, qui permet de tester de façon très sévère la justesse des calculs théoriques présentés au chapitre 1. L'ensemble des efforts s'est donc tout d'abord porté sur l'optimisation de la résolution du dispositif. Cette optimisation passe par l'utilisation d'une cible très froide, la possibilité de commuter le champ magnétique, mais aussi par un travail de simulation important sur le spectromètre et son détecteur, effectué au cours de cette thèse. Le deuxième objectif était de pouvoir utiliser une cible orientée à l'aide de lasers. Un dispositif optique dédié à cette *préparation* de la cible ainsi qu'à sa caractérisation a donc été développé. Dans ce chapitre, les éléments du dispositif vont être décrits en détails. Une vue d'ensemble du dispositif est tout d'abord donnée sur la figure 2.6.

2.1 Le piège magnéto-optique

La distribution des niveaux d'énergies, propre à chaque atome, ainsi que la faible gamme de fréquence couverte par un dispositif laser font qu'un piège magnéto-optique est spécifique à quelques espèces atomiques tout au plus. Dans notre cas, le MOT est conçu pour pouvoir piéger des atomes de ^{87}Rb et ^{85}Rb . Dans cette partie nous allons décrire uniquement le piégeage du ^{87}Rb pour lequel nous avons utilisé deux transitions atomiques. La première ($5^2S_{1/2}, F = 2 \rightarrow 5^2P_{3/2}, F' = 3$) est utilisée pour piéger les atomes, la seconde ($5^2S_{1/2}, F = 1 \rightarrow 5^2P_{3/2}, F' = 2$) permet de réinjecter dans le cycle de piégeage les atomes perdus dans l'état $5^2S_{1/2}, F = 1$.

2.1.1 La cavité laser

Les deux transitions utilisées pour le piégeage nécessitent donc deux faisceaux lasers qui sont produits par des diodes lasers à semi-conducteur Toptica DL100. La configuration dite à cavité externe de ces diodes lasers (figure 2.7) permet d'ajuster précisément la longueur d'onde et de bénéficier d'une très bonne largeur spectrale.

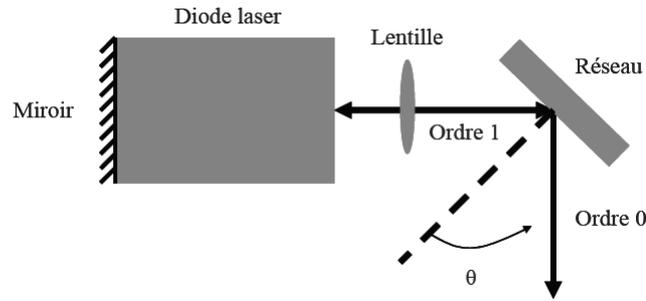


FIGURE 2.7: Diode laser à semi-conducteur et sa cavité externe.

Le miroir et le réseau de diffraction limitent la cavité résonante permettant l'amplification du faisceau laser. C'est l'ordre 1 qui est utilisé pour cette amplification. L'ordre 0 correspondant à une simple réflexion sur le réseau et permet d'extraire le faisceau laser. L'équation caractéristique qui décrit le phénomène de diffraction produit par le réseau s'écrit :

$$d(\sin\theta_m - \sin\theta_i) = \lambda \quad (2.28)$$

où d est le pas du réseau, θ_m l'angle entre le faisceau diffracté d'ordre m et la normale au réseau et θ_i l'angle entre le faisceau incident et la normale au réseau. Afin que l'ordre 1 de diffraction soit rétro-réfléchi, la condition suivante doit être respectée :

$$2d\sin\theta = m\lambda \quad (2.29)$$

où θ est l'angle de diffraction de l'ordre 0 pour une longueur d'onde λ .

Dans un premier temps, l'angle du réseau de diffraction est ajusté grossièrement à l'aide d'une vis micrométrique de manière à ce que la longueur d'onde du faisceau laser soit dans la gamme des longueurs d'ondes qui nous intéressent pour le piégeage du Rb. Ce réglage est contrôlé à l'aide d'un lambdamètre. Ensuite, l'angle du réseau de diffraction peut être ajusté finement à l'aide d'une tension de contrôle appliquée à un élément piézoélectrique sur lequel est fixé le

réseau de diffraction. Le contrôle précis de l'angle du réseau de diffraction permet évidemment un contrôle précis de la longueur d'onde d'émission de l'ensemble diode laser et cavité externe. Les caractéristiques d'émission de la diode laser dépendent de la température et de l'intensité du courant traversant la jonction de la diode. Pour limiter toutes dérives, un élément Peltier permet de contrôler la température de la diode.

Chacune des deux diodes lasers délivre un faisceau laser d'une puissance proche de 100mW.

2.1.2 Les modulateurs acousto-optiques (AOM)

Les faisceaux laser utilisés pour le piégeage magnéto-optique ainsi que pour la polarisation de la cible nécessitent un contrôle précis de leurs positions et de leurs fréquences. A cet effet les AOM (*acousto-optic modulator*) ont été employés à différents points stratégiques. Comme leur nom l'indique, les AOMs permettent de moduler en fréquence un rayonnement lumineux les traversant en faisant interagir ce rayonnement avec une onde acoustique. Une tension alternative haute fréquence est appliquée sur un cristal de quartz. Elle force le cristal à vibrer et génère des ondes sonores qui se propagent à l'intérieur. Ces dernières provoquent des plans de compression et de dilatation du matériau qui modifient l'indice de réfraction du milieu au rythme de la fréquence acoustique. Afin d'optimiser l'intensité diffractée, le faisceau laser doit être envoyé avec un angle bien défini par rapport à la normale à l'axe de propagation de l'onde acoustique dans le quartz (voir figure 2.8). Cet angle d'incidence est l'angle de Bragg, θ_B . Lors de la traversée du cristal par le faisceau laser on observe un phénomène de diffraction : une partie du faisceau n'interagit pas avec l'onde acoustique et n'est donc ni diffractée ni modulée, c'est l'ordre 0 ; une portion du faisceau est diffractée à un angle $2\theta_B$, c'est l'ordre -1 qui sera utilisé pour le piège magnéto-optique.

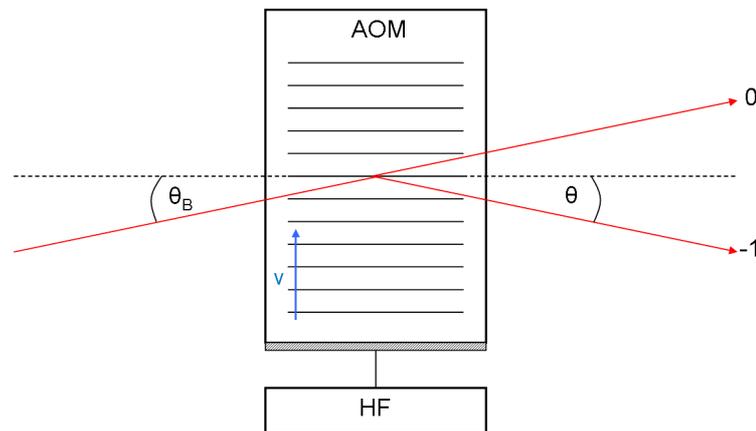


FIGURE 2.8: Schéma de principe du fonctionnement d'un AOM.

Des alimentations spécifiques développées au LPC ont été adaptés aux AOMs de manière à délivrer la haute fréquence et d'y coupler une entrée TTL permettant de commuter rapidement cette haute fréquence. Ainsi l'ordre -1 peut être contrôlé (allumé ou éteint) avec un signal logique. Cette fonctionnalité est notamment exploitée pour préparer la cible froide lors d'acquisition de données sur cible excitée ou orientée. Leur intérêt concernant l'asservissement des fréquences lasers sera détaillé dans la partie 2.1.4.

2.1.3 Montage optique

Le schéma du montage optique utilisé pour le piégeage est présenté sur la figure 2.9. Les deux diodes lasers permettent de délivrer les faisceaux lasers de piégeage et de repompage. Celles-ci sont immédiatement suivies d'isolateurs optiques empêchant le retour de faisceaux réfléchis qui pourraient endommager la diode laser. Une lame semi-réfléchissante est ensuite placée sur le trajet de chacun des faisceaux de façon à en prélever une fraction, qui sera utilisée dans un dispositif d'asservissement en fréquence basé sur la spectroscopie d'absorption saturée. Les diodes utilisées fournissent des faisceaux polarisés linéairement, l'ajout de lame demi-onde permet d'ajuster l'axe de cette polarisation et d'effectuer la superposition des deux faisceaux à l'aide d'un cube polariseur (PBSC). Une fois alignés, le faisceau laser résultant est envoyé dans l'AOM dit *switch*. Cet AOM se nomme ainsi car c'est grâce à lui que la commutation rapide des faisceaux lasers dans la chambre de collision est possible. A la sortie de cet AOM, l'ordre 0 est récupéré pour le dispositif de polarisation qui sera détaillé dans une partie ultérieure de ce chapitre. Pour le piégeage, nous utilisons l'ordre -1 qui est modulé avec une fréquence de -110 MHz. Celui-ci est finalement élargi par un télescope constitué de deux lentilles dont le rapport des focales f_1/f_2 vaut 0.1 . Le faisceau est ensuite divisé en trois faisceaux d'intensités équivalentes. Cette séparation est réalisée par deux couples constitués d'une lame demi-onde et d'un cube polariseur. Les trois faisceaux sont ensuite envoyés selon trois directions orthogonales de l'espace vers le centre de la chambre de collision, puis polarisés circulairement par des lames quarts-d'ondes à l'entrée de celle-ci. A leurs sorties, ils sont rétro-réfléchis et font un double passage dans une seconde lame quart-d'onde de façon à inverser leurs états de polarisation.

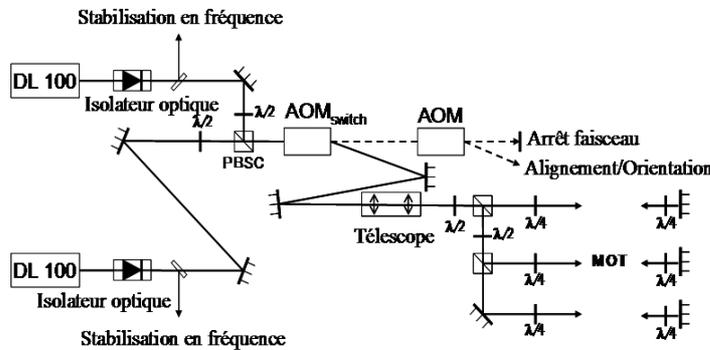


FIGURE 2.9: Mise en forme des faisceaux lasers en vue du piégeage magnéto-optique.

Les intensités des faisceaux lasers doivent être égales deux à deux pour que le nuage d'atomes reste en équilibre. Une légère convergence du faisceau est imposée pour compenser l'atténuation des faisceaux rétro-réfléchis par le hublot, la lame quart-d'onde et le miroir.

2.1.4 Asservissement des fréquences lasers

Afin de favoriser l'interaction entre des atomes ayant une certaine classe de vitesse et le faisceau laser permettant de les refroidir il faut contrôler la fréquence au MégaHertz près, soit une précision relative de l'ordre de 10^{-9} . De plus, pour éviter des réglages continus dus aux dérives thermiques de l'environnement et aux vibrations, il est nécessaire d'asservir la fréquence délivrée par chacune des diodes. Cet asservissement est réalisé à l'aide d'un montage associé à

chaque diode qui repose sur le principe de la spectroscopie d'absorption saturée dont le signal, une fois traité, est envoyé via une boucle de rétro-action à l'élément piezoélectrique de la diode pour compenser ces dérives.

La spectroscopie d'absorption saturée. Aussitôt après l'émission du faisceau par la diode laser et le passage par l'isolateur optique, une lame séparatrice est placée sur le parcours de la lumière. Cette lame a pour effet de prélever une partie du faisceau incident (quelques mW). Ce faisceau de faible intensité nous sert à réaliser l'asservissement de la fréquence d'émission des diodes lasers. Le laser effectuera un double passage dans un AOM permettant de contrôler précisément la fréquence laser. Ensuite, le laser est séparé en trois faisceaux à l'aide d'une lame séparatrice épaisse. Le premier d'entre eux, le faisceau référence, va traverser une cellule de rubidium et sera directement détecté, par une photodiode, à la sortie afin de servir de référence. Les deux autres faisceaux, les faisceaux *sonde* et *pompe*, seront également envoyés dans cette cellule de rubidium mais de façon à s'y croiser avec un angle le plus faible possible et dans des sens opposés. Le faisceau *sonde* sera détecté par une autre photodiode afin d'observer son profil d'absorption saturée. L'ensemble de ce montage, identique pour la stabilisation en fréquence des deux diodes lasers est présenté sur la figure 2.10. On peut identifier les raies d'absorption correspondant aux transitions des deux isotopes du Rb, à partir des niveaux hyperfins de l'état fondamental. Cependant, l'élargissement Doppler ne permet pas de distinguer les niveaux hyperfins peuplés dans l'état excité. Le spectre d'absorption du faisceau sonde permet de s'affranchir de cet élargissement Doppler.

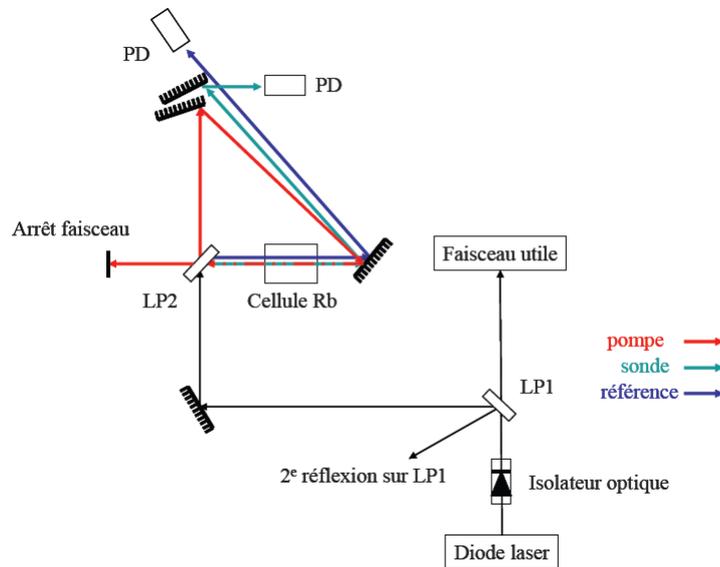


FIGURE 2.10: Dispositif de spectroscopie d'absorption saturée utilisé pour le contrôle et la stabilisation en fréquence des faisceaux lasers.

Pour la référence, on obtiendra alors le spectre d'absorption du rubidium présenté sur la figure 2.11.

Si l'on considère un faisceau laser dont la fréquence vaut ν_0 , les atomes de la cellule de rubidium verront, par effet Doppler, une fréquence relative :

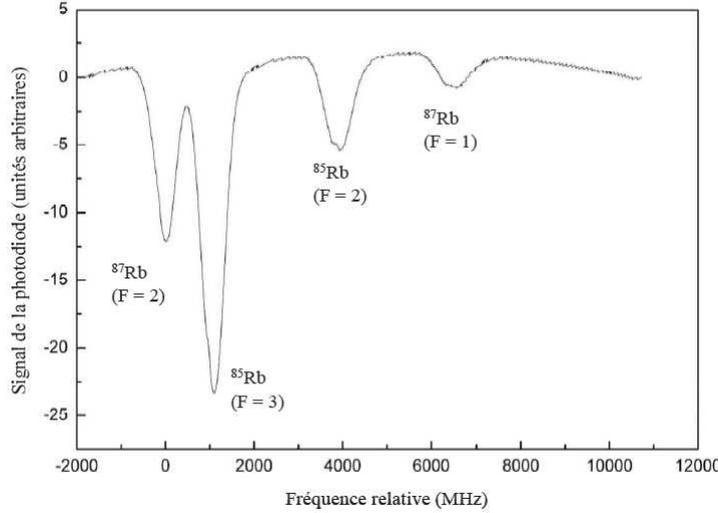


FIGURE 2.11: Spectre d'absorption du ^{85}Rb et ^{87}Rb obtenu par le signal du faisceau référence.

$$\nu_r = \nu_0 \left(1 \pm \frac{v}{c}\right) \quad (2.30)$$

qui dépendra de la composante de leurs vitesses v selon l'axe de propagation du laser. Si le mouvement de l'atome se fait de façon orthogonale à la direction de propagation du faisceau laser ($v = 0$), la fréquence perçue par l'atome, i.e. ν_1 ou ν_2 , est égale à la fréquence de la transition hyperfine. L'atome, dans ce cas, pourra absorber des photons issus du laser pompe comme du laser sonde de manière équivalente. Une partie des atomes absorbent des photons du faisceau pompe, ce qui laisse un nombre d'atomes moins important pour absorber les photons du faisceau sonde. Ce phénomène se produit pour les atomes vérifiant la condition $v = 0$, donc l'élargissement Doppler n'intervient plus et on observe alors une meilleure transmission aux fréquences correspondantes aux transitions entre niveaux hyperfins. Ces défauts d'absorption sont appelés des *lamb dips*. Les figures 2.12 et 2.13 représentent les signaux issus du faisceau de référence et du faisceau sonde où l'on voit apparaître les *lamb dips* dans le cas de la sonde.

Lorsque la fréquence laser vaut $\nu_l = (\nu_a + \nu_b)/2$ où ν_a et ν_b sont les fréquences de deux transitions d'un même niveau initial vers deux niveaux hyperfins adjacents, les photons du faisceau pompe et du faisceau sonde peuvent également être absorbés par les mêmes atomes. Pour des atomes se déplaçant vers la sonde, l'effet Doppler fait que la fréquence perçue par ces atomes peut être décalée de la moitié de $\nu_b - \nu_a$, ils effectueront donc une transition vers l'état correspondant à la transition de fréquence ν_b . Ces mêmes atomes perçoivent la fréquence du faisceau pompe diminuée du même facteur et peuvent alors effectuer une transition vers le niveau hyperfin correspondant à la transition de fréquence ν_a . Le défaut d'absorption, pour la sonde, qui en résulte, appelé communément *cross-over*, se situe à une fréquence $(\nu_a + \nu_b)/2$.

La modulation en fréquence. Afin d'asservir les fréquences des lasers sur les fréquences des transitions souhaitées, les signaux issus des faisceaux référence et sonde sont traités à l'aide d'un dispositif électronique. Les signaux passent tout d'abord par un étage d'amplification réglable, de manière à obtenir deux signaux de même amplitude. Ensuite, le signal de référence

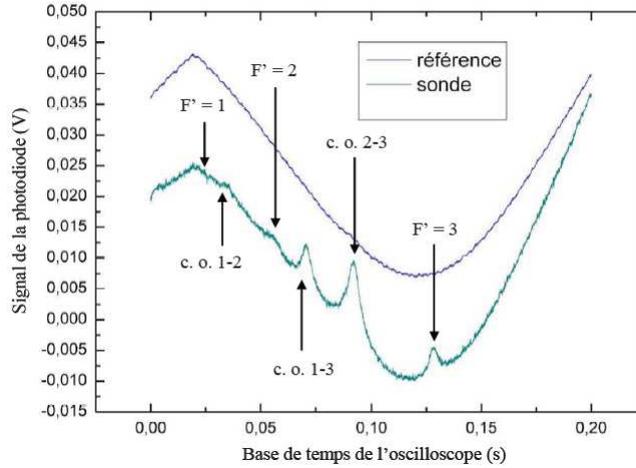


FIGURE 2.12: Signaux sonde et référence pour la raie $5^2S_{1/2}F = 2$ vers $5^2P_{3/2}$ du ^{87}Rb .

est soustrait au signal sonde afin de récupérer un signal ne laissant apparaître que les *lamb dips* correspondants aux transitions vers les niveaux hyperfins et les *cross-over* correspondants (voir figure 2.13).

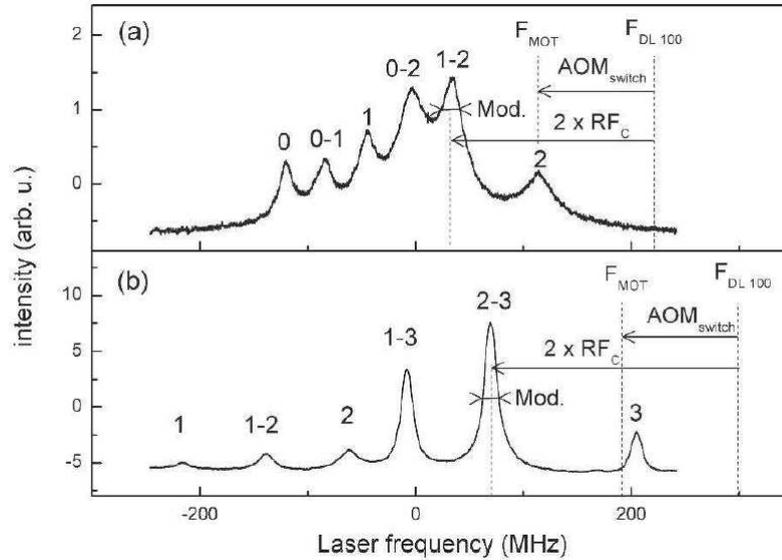


FIGURE 2.13: Signal obtenu après amplification et soustraction du signal de référence au signal sonde, pour la transition $5^2S_{1/2}F = 1$ vers $5^2P_{3/2}$ du ^{87}Rb (a) et $5^2S_{1/2}F = 2$ vers $5^2P_{3/2}$ du ^{87}Rb (b). Les fréquences des lasers en différents points du montage optique sont également indiquées.

L'asservissement se fait selon le principe présenté par Lewandoski *et al.* [70]. Le double passage du faisceau laser dans l'AOM (AOM_{satabs}) du montage dédié à la spectroscopie d'absorption saturée décale sa fréquence de deux fois la fréquence appliquée à cet AOM, RF_c (voir figure 2.13). Notons ici que le double passage permet de s'affranchir des variations de l'angle de diffraction de Bragg lorsque l'on modifie la fréquence appliquée à l'AOM. La fréquence de

modulation permettant de révéler les dérives fréquentielles du laser est ajoutée à la fréquence nominale de l'AOM_{satabs}. Ainsi, la fréquence du laser au sein du dispositif *satabs*, est modulée autour de l'un des pics de la figure 2.13. Le signal d'absorption en résultant est envoyé dans un module de détection synchrone. Ce module de détection synchrone contient un multiplieur permettant la multiplication du signal sonde et de la modulation. Enfin, un intégrateur permet d'intégrer l'erreur du signal résultant de la multiplication. Le signal inversé est ensuite envoyé sur l'élément piézoélectrique afin de compenser les dérives de la diode laser. La fréquence RF_c permet de contrôler indirectement la fréquence laser de sortie de la diode laser. Ensuite le passage des deux faisceaux laser dans l'AOM_{switch} permet de recaler cette fréquence quelques MHz seulement en dessous des deux fréquences de transition utilisées pour le piégeage et le repompage.

L'AOM_{satabs} dédié à la stabilisation en fréquence du laser de piégeage est soumis à une tension alternative de fréquence de 110 MHz, ce qui permet d'accéder à une gamme de la fréquence après le double passage de 170 à 270 MHz. Pour l'AOM_{satabs} dédié à la stabilisation en fréquence du laser de repompage, cette fréquence est de 80 MHz. La gamme en fréquence accessible s'étend alors de 120 à 200 MHz.

2.1.5 Le champ magnétique de piégeage

Le piège magnéto-optique nécessite le couplage entre six faisceaux lasers polarisés circulairement et orientés deux à deux selon trois directions orthogonales de l'espace auquel vient s'ajouter un champ magnétique quadrupolaire qui, une fois les atomes refroidis par les lasers, va permettre de les confiner. Typiquement, le gradient de champ magnétique nécessaire au piégeage est de l'ordre de 10 à 20 Gauss/cm.

La configuration du champ de piégeage. Ce champ magnétique est créé par une paire de bobines en configuration anti-Helmholtz placée à l'extérieur de la chambre de collision. Cette configuration a été retenue car la spectroscopie d'impulsion d'ion de recul nécessite qu'un spectromètre soit directement placé autour de la zone de collision. L'éloignement des bobines a pour conséquence de nécessiter des courants forts et un grand nombre d'enroulements.

L'importance du fast-switch du champ magnétique. Lors des expériences menées durant cette thèse, le champ magnétique de piégeage était coupé de façon cyclique. Le schéma logique représentant un cycle d'acquisition est fourni figure 2.14, ce cycle dure 12 ms dont 9 ms sont dédiées au refroidissement et au piégeage des atomes et 3 ms à la prise de données sans champ magnétique.

En effet, lors d'un processus de capture électronique, la cible est ionisée et collectée à l'aide d'un champ électrique généré par l'empilement d'électrodes composant le spectromètre. Durant le vol de ces particules au travers du spectromètre, la présence de champ magnétique causerait une forte déviation de la trajectoire des ions et donc altérerait le temps et la position de détection. L'impulsion des ions de recul étant reconstruite à partir de ces observables, il est fondamental qu'elles ne soient pas erronées. Le champ magnétique de piégeage doit être coupé, afin d'obtenir des données pour lesquelles les trajectoires des ions de reculs ne sont pas perturbées.

La difficulté à mettre en place une telle commutation vient du fait que nous utilisons pour nos bobines des courants proches de 2 Ampères circulant dans deux enroulements de mille spires chacun. L'inductance des bobines est ici de 1.4 H. L'autre contrainte est celle sur le

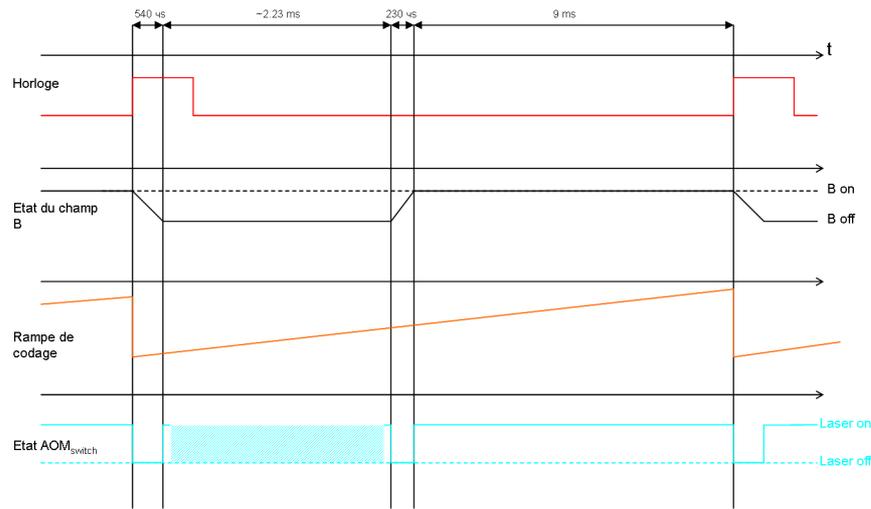


FIGURE 2.14: Séquence logique permettant d’automatiser les cycles de piégeage et d’acquisition de données. La partie hachurée pour l’état des AOMs correspond à une alternance *laser on-laser off* de période $100\mu\text{s}$. Lorsque les lasers sont *off*, tous les atomes cible sont dans l’état fondamental (5s). Lorsque les lasers sont *on*, la cible est un mélange d’atomes dans les état fondamental (5s) et excité (5p).

temps pendant lequel il est possible de relâcher la cible sans qu’elle ne se dissipe. Pour le cycle choisi ici, la commutation doit se faire sur une durée de l’ordre de $100\mu\text{s}$.

Une rampe de tension est synchronisée avec le cycle du champ magnétique et envoyée au système d’acquisition afin d’enregistrer le temps écoulé au sein du cycle.

Le schéma électronique du *switch* est présenté sur la figure 2.15. Les détails concernant ce dispositif électronique sont donnés dans la référence [56]. Lors de l’extinction du champ magnétique par ce dispositif, le circuit est ouvert par deux IGBT (*insulated gate bipolar transistor*) et la puissance est dissipée par un ensemble de 30 diodes TVS (*transiant voltage diodes*).

2.1.6 Caractérisation de la cible froide

L’ensemble qui vient d’être présenté constitue le MOT. Ce piège permet de produire un nuage d’atomes froids pouvant ensuite être utilisée comme cible dans diverses expériences de collisions. L’action sur les atomes piégés se faisant par absorption et émission de photons, il est possible à l’aide d’une caméra CCD calibrée de déterminer la taille, la densité ainsi que la température du nuage cible.

Calibration de la caméra CCD. Avant de pouvoir caractériser le nuage d’atomes, il faut calibrer la caméra CCD en position et en intensité. La caméra utilisée est une caméra CCD refroidie à déclenchement rapide. Cette calibration est effectuée à l’aide d’un des faisceaux laser de piégeage. Comme le montre la figure 2.16, le faisceau passe par deux miroirs avant d’être atténué puis envoyé vers la caméra. De cette façon il est possible de déterminer la réponse de la caméra en balayant son objectif dans deux directions orthogonales. Le second miroir, placé à la même distance que le nuage d’atomes piégés, joue ici le rôle de source ponctuelle. Cette opération permet de déduire l’angle solide de détection.

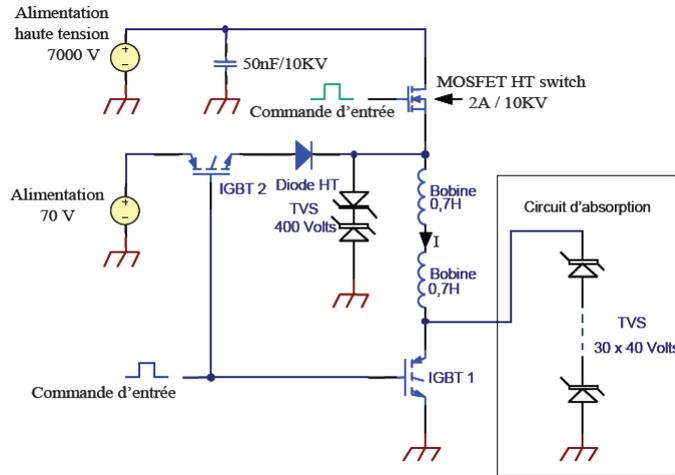


FIGURE 2.15: Schéma de l'électronique permettant de commuter rapidement de champ magnétique de piégeage.

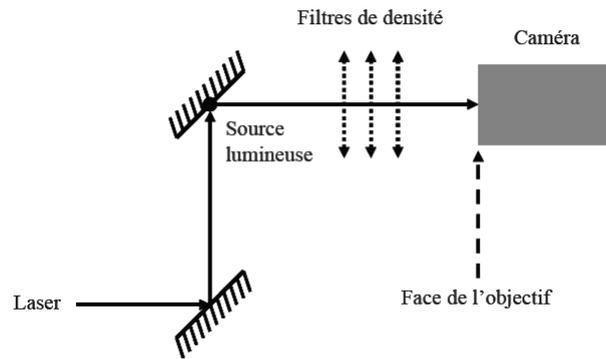


FIGURE 2.16: Montage permettant de calibrer la caméra CCD en intensité.

Il est également nécessaire de déterminer la réponse de la caméra aux photons du laser lorsque le faisceau arrive de façon normale sur l'objectif. Sachant que les photons incidents ont une longueur d'onde de 780.6 nm on a pour chaque photon une énergie :

$$E_{\text{photon}} = 2.545 \times 10^{-9} J \tag{2.31}$$

On déduit ensuite le signal attendu pour un seul photon incident, noté S_{photon} , du signal lumineux S donné par la caméra pour un temps d'intégration t :

$$S_{\text{photon}} = \frac{SE_{\text{photon}}}{N_e t P} \tag{2.32}$$

où N_e est le nombre d'expositions utilisées pour effectuer la mesure et P la puissance incidente du laser après atténuation qui vaut ici 22.1 nW. Cette puissance est mesurée indépendamment à l'aide d'un Wattmètre. Il faut donc maintenant trouver l'angle solide couvert par la

caméra. Pour cela, on balaye l'objectif selon deux axes orthogonaux afin d'observer la réponse de celle-ci. La figure 2.17 représente la réponse de la caméra pour un balayage horizontal et vertical.

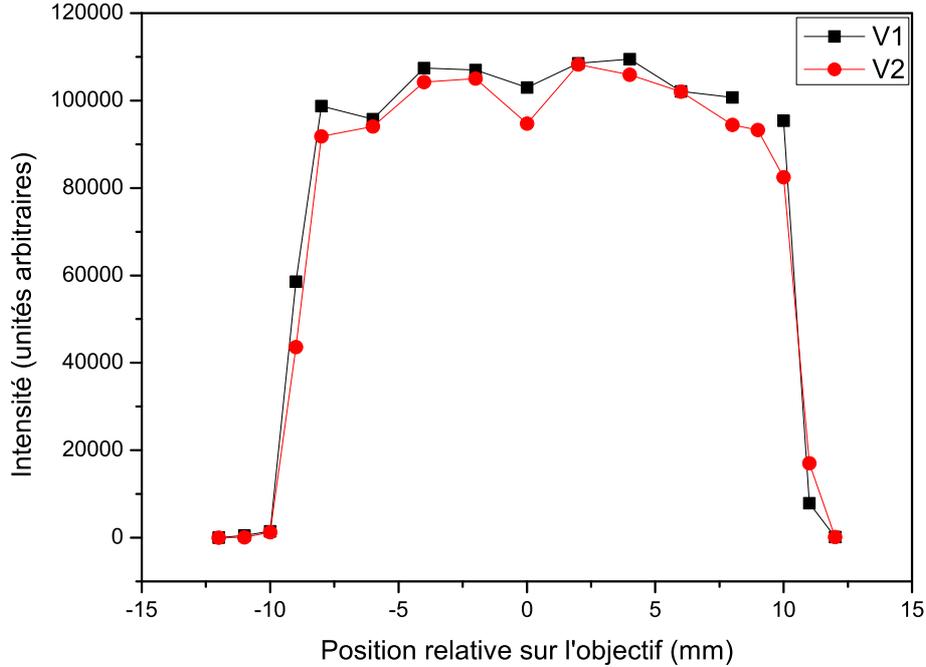


FIGURE 2.17: Réponse de la caméra CCD en fonction de l'angle du faisceau incident par rapport à la normale à l'objectif. La série notée V1 correspond à un balayage vertical de l'objectif et la série V2 à un balayage horizontal.

En se normalisant au signal obtenu à incidence normale, on en déduit un angle solide de détection de $\Omega = 4.3 \times 10^{-5}$ sr. Le signal de la caméra pour une source ponctuelle émettant des photons dans 4π vaut alors :

$$S_{4\pi} = S_{\text{photon}} \frac{\Omega}{4\pi} = 2.13 \times 10^{-7} \text{unités de signal par photon émis dans } 4\pi \quad (2.33)$$

Cette efficacité permet donc de déterminer le nombre total de photons émis par une source lumineuse placée ici à 58 cm de l'objectif (distance nominale entre l'objectif et le nuage d'atomes piégés).

Pour la calibration en position, le principe est de placer une feuille de papier millimétré à la distance de 58 cm de l'objectif afin de déterminer la correspondance entre le nombre de canaux et le pas de la feuille de papier millimétré. On trouve 0.075 mm / canal.

Mesure de densité du nuage d'atomes froids. Après avoir calibré la caméra CCD, il est possible d'étudier les caractéristiques du nuage d'atomes sous réserve de connaître les observables tels que le décalage en fréquence entre le laser et la transition atomique utilisée et

les taux d'absorption et d'émission de photons par l'atome. Il suffit alors de mesurer le taux de photons émis par seconde dans la direction de la caméra et de le corriger de l'efficacité de la caméra. Le taux de diffusion d'un atome est exprimé par :

$$\gamma = \frac{f}{\tau} \quad (2.34)$$

où τ est le temps de vie moyen de l'état excité de l'atome et f la fraction excitée que l'on obtient par :

$$f = \frac{I/I_s}{1 + 2I/I_s + (2\delta/\gamma)^2} \quad (2.35)$$

où I_s est l'intensité de saturation donnée par Shah *et al.* [68], qui vaut $I_s = 9.2 \text{ mW/cm}^2$. I est l'intensité totale des six faisceaux lasers. On peut donc calculer γ , mesurer à l'aide de la caméra le taux de photons T_{ph} émis par seconde et en déduire le nombre d'atomes n_{at} :

$$n_{at} = \frac{T_{ph}}{\gamma} \quad (2.36)$$

La taille du nuage est mesurée directement à l'aide de la caméra. Les caractéristiques typiques du nuages d'atomes froids varient en fonction de tous les paramètres du piège, mais principalement avec l'intensité totale et la fréquence laser. Le nuage a typiquement un diamètre de 0.5 mm et une densité atomique de l'ordre de $1.5 \times 10^{11} \text{ atomes/cm}^3$.

Mesure de température du nuage d'atomes froids. L'utilisation d'un MOT permet d'obtenir une cible très froide afin de ne plus être limité par l'impulsion initiale des ions de reculs lors de la spectroscopie. Dans cette partie sera expliquée la méthode utilisée pour déterminer précisément la température de cette cible.

Pour cela, des acquisitions sont faites pour différents temps de relaxation du nuage, c'est-à-dire lorsque les atomes ne sont plus piégés et évoluent librement. On mesure alors la dimension du nuage qui croît à mesure que le temps de relaxation augmente. La température du nuage est donné par :

$$T = \frac{m}{4k_B} \left(\frac{\omega(t)}{t} \right)^2 \quad (2.37)$$

où $\omega(t)$ est le double de la largeur à mi-hauteur en fonction du temps de relaxation t et m la masse des atomes piégés. La figure 2.18 représente l'évolution de la taille du nuage en fonction du temps de relaxation pour différents décalages en fréquence.

Nous avons ainsi pu montrer que pour nos expériences, la température du nuage lors du piégeage en continu des atomes n'excède pas $200 \mu\text{K}$.

2.2 Le spectromètre d'impulsion d'ion de recul

La spectroscopie d'impulsion d'ion de recul est la méthode qui permet de mesurer simultanément les trois composantes de l'impulsion de l'ion de recul produit lors de la collision. Les atomes cibles qui ont subi une collision peuvent perdre par capture électronique leur électron de valence au profit du projectile. Il en résulte que ces particules sont chargées, et peuvent donc être extraites à l'aide d'un champ électrostatique et dirigées vers le détecteur d'ion de

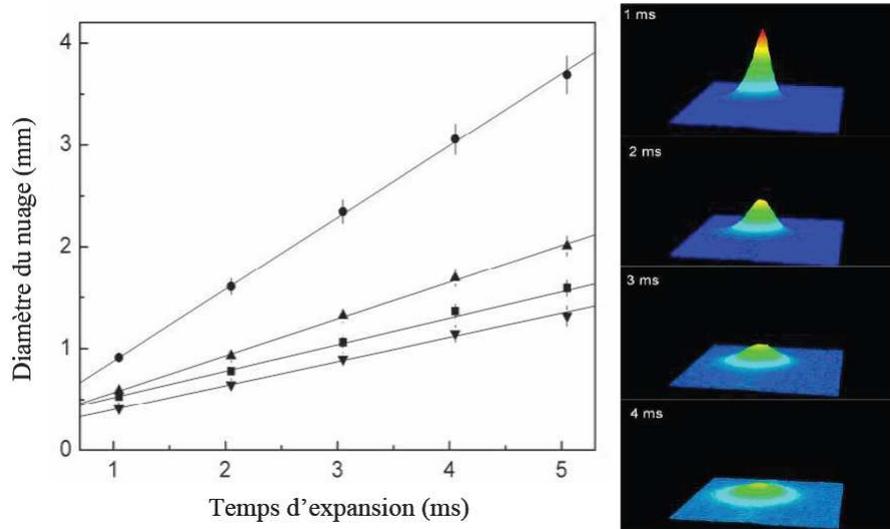


FIGURE 2.18: Évolution du diamètre du nuage avec le temps de relaxation pour différentes valeurs du décalage en fréquence. Par ordre des valeurs décroissantes des pentes, les décalages en fréquence sont respectivement de -8 MHz, -16 MHz, -24 MHz et -32 MHz.

recul sensible en position. La mesure de la position sur ce détecteur ainsi que la mesure du temps de vol des ions permettent de reconstruire leurs impulsions initiales. Le champ électrique d'accélération est produit par le spectromètre. Ce dernier est un empilement de 36 électrodes sur lesquelles sont appliquées trois tensions pour des raisons qui seront explicitées dans la suite de cette section.

Pour obtenir la meilleure résolution possible sur l'impulsion de l'ion de recul et donc sur les observables qui sont calculées à partir de cette impulsion, l'ensemble constitué du spectromètre et du détecteur doit vérifier deux conditions. Tout d'abord, la résolution temporelle et spatiale du détecteur d'ion de recul doit être la meilleure possible. En effet dans le cadre d'une expérience de type MOTRIMS ce n'est plus la température de la cible qui limitera la résolution expérimentale mais celle liée au système de détection. D'autre part, il est impératif que les positions de détection et le temps de vol des ions soient indépendants, au premier ordre, de la position initiale des ions de reculs dans la zone de collision. Ceci signifie que deux ions de recul ayant les mêmes vecteurs impulsion mais des positions initiales différentes dans la zone de collision doivent arriver au même endroit et en même temps sur le détecteur. C'est la raison pour laquelle un spectromètre à champ d'extraction inhomogène a été choisi ici, permettant la focalisation en position et en temps de vol des ions de recul dans le plan du détecteur.

Avant d'en venir aux détails permettant la focalisation, il est important de noter que dans une expérience MOTRIMS comme la nôtre, le spectromètre devra permettre l'accès au moins aux six faisceaux laser du MOT. Comme nous l'avons souligné précédemment, nous avons ici une géométrie d'extraction transverse des ions de recul. Sur l'axe du spectromètre, on trouvera alors le détecteur d'ion de recul d'un côté et la caméra CCD. La figure 2.19 représente le schéma de la chambre de collision entourant le spectromètre avec les multiples accès prévus.

La chambre de collision est en acier inoxydable et amagnétique 316L, son diamètre intérieur est de 100 mm. Les six accès pour les lasers ont un diamètre de 40 mm, ainsi que les accès du faisceau projectile. Enfin, douze autres ouvertures sont présentes pour permettre d'appliquer

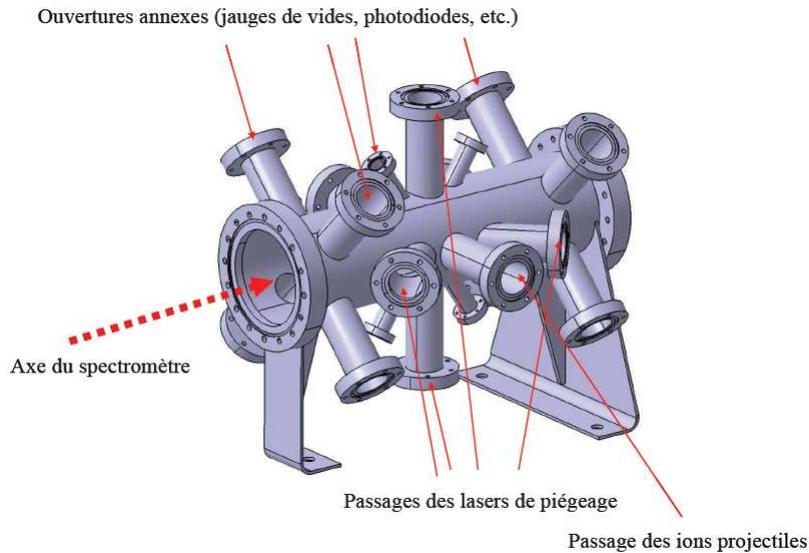


FIGURE 2.19: Représentation de la chambre de collision du dispositif LPC-MOT avec ses nombreux accès prévus notamment pour les faisceaux lasers du MOT, le faisceau projectile et d'éventuels dispositifs d'imagerie.

les tensions de polarisation du spectromètre, de placer des jauges de pression, des photodiodes ou d'envoyer d'autres faisceaux lasers.

Quant au spectromètre, il est composé de 36 électrodes en acier inoxydable 316L de diamètre intérieur 60 mm, de diamètre extérieur 97 mm et de 1.5 mm d'épaisseur. Les électrodes sont normalement espacées de 7 mm bord à bord. Des accès pour les lasers ont également été laissés en usinant les électrodes concernées. Enfin, la dernière électrode a une géométrie particulière et se joint au tube de vol libre dont le diamètre intérieur est de 68 mm. La zone de collision se trouve entre la 20^e et la 21^e électrode en partant du côté opposé au détecteur d'ion de recul. Des résistances de 100k Ω relient chaque électrode afin de polariser l'ensemble du spectromètre avec seulement trois tensions. La longueur totale du spectromètre est de 357.5 mm et la distance entre la zone de collision et la zone sensible du détecteur d'ion de recul est de 853.5 mm. Une tension de polarisation positive est appliquée sur la première électrode, en suivant la même logique que précédemment pour leur numérotation, et les deux autres tensions sont appliquées sur la 22^e et la 36^e électrode. Ces trois tensions sont optimisées pour obtenir la meilleure focalisation spatiale et temporelle des ions de reculs sur le détecteur de façon à laisser le potentiel le plus proche de zéro au niveau de la zone de collision. Ce dernier point permet de minimiser la déflexion du faisceau projectile par le champ d'extraction. La figure 2.20 présente une coupe longitudinale du spectromètre.

2.2.1 Principe de la focalisation en position et en temps de vol (TOF) des ions de recul

Les propriétés de focalisation requises pour obtenir une haute résolution sur l'impulsion des ions de recul sont de deux ordres : une focalisation en position, selon les coordonnées X et Y du plan du détecteur et une focalisation en temps de vol, qui permet de mesurer la composante sur l'axe Oz de l'impulsion des ions de recul. Ces propriétés sont obtenues en créant un léger

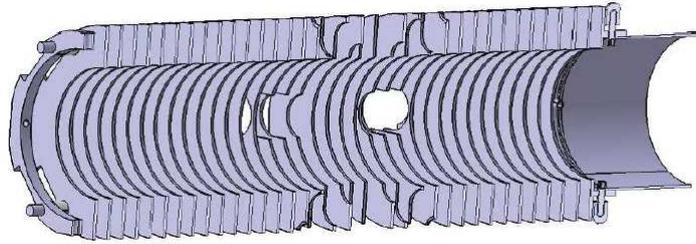


FIGURE 2.20: Coupe longitudinale du spectromètre d'impulsion d'ion de recul.

effet de lentille électrostatique au niveau de la zone de collision.

La première méthode consiste à alterner une zone de champ fort et une zone de champ faible, proche de la collision. La seconde méthode, plus difficile à mettre en place expérimentalement consiste à alterner champ faible-champ fort-champ faible.

La figure 2.21 présente le principe de la focalisation en position des ions de recul. Pour des ions de recul dont l'impulsion initiale est identique mais qui partent de position initiales différentes, la focalisation permet, si le détecteur est placé dans le plan de focalisation, de s'affranchir au premier ordre, de leurs positions initiales.

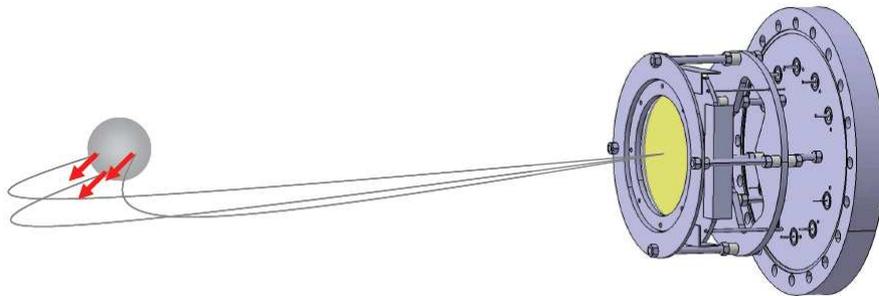


FIGURE 2.21: Représentation schématique de la focalisation spatiale des ions de recul ayant une même impulsion initiale sur le détecteur associé.

Pour ce qui est de la focalisation en temps de vol, le principe reste le même mais dans son application, il est nécessaire d'inclure une zone de vol libre où le champ électrique est nul. Des ions de recul partant au même moment, de mêmes impulsions initiales mais de positions initiales différentes arriveront alors dans le plan de détection en même temps. Ce principe est illustré par la figure 2.22.

Dans les deux cas, la focalisation en position dans un plan transverse à l'axe longitudinal du spectromètre et la focalisation en temps de vol sont indépendantes. Le but des simulations qui vont être présentées maintenant est de trouver la géométrie ainsi que les caractéristiques du champ électrique inhomogène du spectromètre menant à la superposition de ces deux plans de focalisation.



FIGURE 2.22: Représentation schématique de la focalisation temporelle des ions de recul ayant une même impulsion initiale sur le détecteur associé.

2.2.2 Simulation des propriétés de focalisation du spectromètre

La lentille électrostatique est créée dans notre cas par une configuration champ fort - champ faible généré par l'application de trois tensions sur les électrodes du spectromètre.

La tension dite d'extraction, côté détecteur (notée V_{av}) est négative et sa valeur est fixée de manière à ce que tous les ions de recul produits lors de capture électronique soient collectés sur le détecteur. La tension appliquée sur la première électrode, à l'opposé de V_{av} , est appelée V_{ar} et sa tension est déterminée par le résultat des simulations qui vont être présentées ici. Finalement, la tension dite de focalisation, V_{foc} , qui va créer la lentille électrostatique est appliquée sur la 22^e électrode, soit juste après la zone de collision qui se trouve entre la 20^e et la 21^e électrode. La différence de potentiel entre deux électrodes dans la zone de champ faible est notée U_f et dans la zone de champ fort, U_F . La figure 2.23 représente le spectromètre avec les zones de champ fort et faible ainsi que les électrodes et les tensions appliquées.

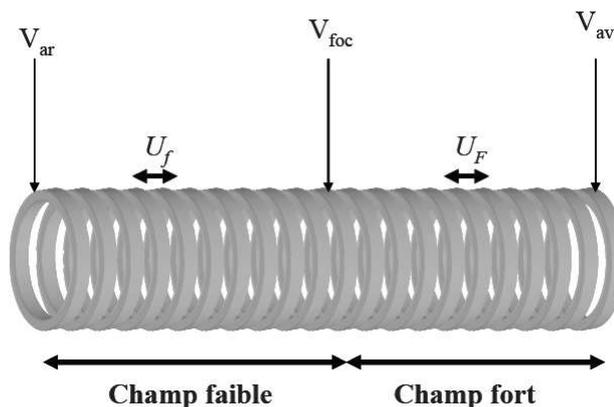


FIGURE 2.23: Représentation schématique des électrodes constituant le spectromètre et de l'application des tensions permettant de créer la zone de champ faible et la zone de champ fort.

Dans les simulations réalisées ici, le but est de déterminer les tensions à appliquer aux trois points du spectromètre et la distance exacte à laquelle placer le détecteur pour qu'il soit confondu avec les deux plans de focalisation. Pour cela, nous avons imposé les conditions initiales en prenant des cas très proches de ce qui se passe vraiment lors d'une expérience. Ainsi pour

la distribution en position, nous avons choisi une distribution gaussienne à trois dimensions de largeur à mi-hauteur 0.5 mm en accord avec les mesures de caractérisation du nuage d'atomes froids. Pour les impulsions initiales, nous avons considéré un Q de réaction de 1, 2 et 3 eV et des angles de diffusion de 250, 500 et 1000 μrad , caractéristiques des événements que nous avons observés.

La simulation permet d'obtenir la position des plans focaux en position et en temps de vol en fonction du rapport entre le champ fort et le champ faible. Toutes les caractéristiques techniques du spectromètre ont été incluses dans les simulations, ainsi que les écarts entre les côtes théoriques et réelles. Ce travail de simulation avait été initié dans le cadre de la thèse de J. Blicck [56]. Cependant, dans les résultats obtenus au cours de cette thèse, la résolution sur les composantes transverses de l'impulsion de l'ion de recul s'est avérée moins bonne qu'attendue. Notre travail d'investigation a par la suite montré un désalignement du spectromètre par rapport à la zone de collision, et d'autre part un décalage non négligeable entre les dimensions réelles du spectromètre et celles utilisées par la simulation. De nouvelles simulations ont du être réalisées et le spectromètre a été précisément réaligné. La figure 2.24 présente les résultats obtenus avec ces nouvelles simulations. On trouve que les plans focaux se superposent pour un rapport $\frac{U_F}{U_f}$ de 1.605 à une distance de 845 mm, au lieu du rapport $\frac{U_F}{U_f}$ de 1.620 à une distance de 853.5 mm précédemment obtenus. Pour les expériences réalisées au cours de cette thèse, les ions sont extraits à une énergie de 20 eV, c'est-à-dire en utilisant une tension V_{av} de -20 V.

2.3 Le faisceau projectile

Afin d'avoir un dispositif autonome, indépendant des installations telles que ARIBE (Accélérateurs pour les recherches avec les ions de basse énergie) sur le site du GANIL (Grand accélérateur national d'ions lourds), il a été décidé dans le travail de thèse précédent celui-ci [56] de développer une source d'ions permettant de délivrer des alcalins ou des alcalino-terreux à des énergies comprises entre 0.5 et 10 keV. La ligne projectile est composée d'une source thermoïonique dont les électrodes d'extraction et d'accélération permettent une première mise en forme du faisceau, de deux lentilles Einzel, de deux déflecteurs électrostatiques et de deux paires de fentes réglables. En sortie de la chambre de collision, un déflecteur électrostatique permet l'analyse en charge du faisceau. Le faisceau primaire est défléchi vers une cage de Faraday alors que les projectiles neutralisés par capture électronique continuent leurs trajectoires rectilignes jusqu'au détecteur sensible en position.

L'ensemble de la géométrie des électrodes et de la ligne faisceau a été déterminé par simulation lors de la thèse de J. Blicck afin d'optimiser l'extraction des ions et la mise en forme du faisceau.

2.3.1 La source d'ion

La source thermoïonique est un ensemble constitué d'une matrice d'aluminosilicates contenant l'espèce choisie comme projectile, ici du sodium. Ce composé est porté à une température d'environ 1000°C par un filament afin d'ioniser simplement le sodium. Les géométries du support ainsi que de l'électrode d'extraction (figure 2.25) ont été étudiées afin d'optimiser l'extraction des ions. Le courant à la sortie de la source peut atteindre 1 μA aux énergies citées précédemment.

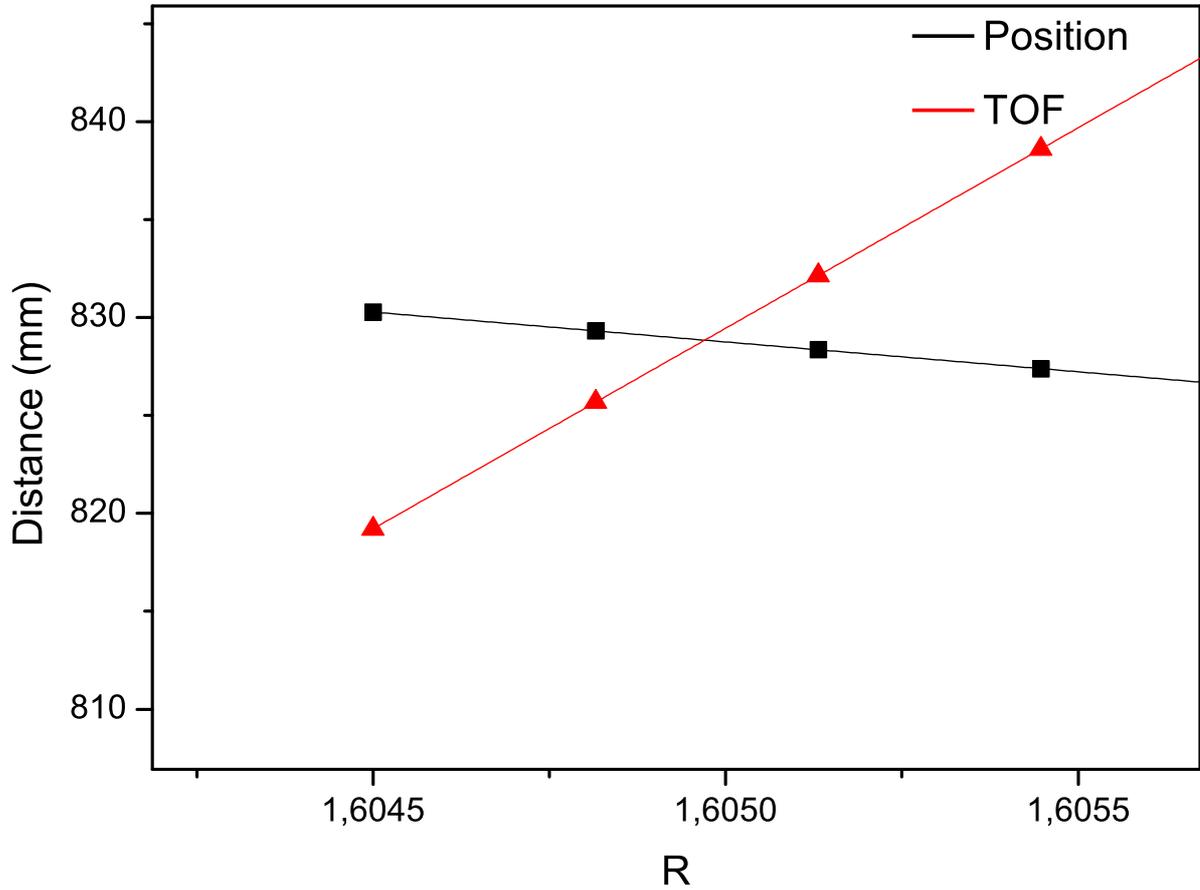


FIGURE 2.24: Evolution de la position des plans focaux en position et en temps de vol des ions de reculs en fonction du rapport $R = \frac{U_E}{U_f}$.

2.3.2 La mise en forme du faisceau projectile

Le faisceau extrait et accéléré à la sortie de la source est ensuite mis en forme à l'aide de deux lentilles électrostatiques. Pour des ions chargés positivement, la focalisation sera d'autant plus forte que le potentiel appliqué à la lentille est élevé. L'objectif de ces deux lentilles est de focaliser le faisceau projectile au niveau du nuage d'atomes cible tout en diminuant au maximum sa divergence.

Après les lentilles suivent deux paires de déflecteurs électrostatiques qui permettent de guider le faisceau projectile afin d'optimiser son recouvrement avec la cible. Les tensions appliquées sur ces déflecteurs sont de quelques dizaines de volts tout au plus. L'alignement de la ligne faisceau ainsi que du spectromètre à l'aide d'une lunette de géomètre permet une utilisation très réduite de ces déflecteurs.

Le faisceau projectile est ensuite limité en taille afin de ne pas interagir avec les autres

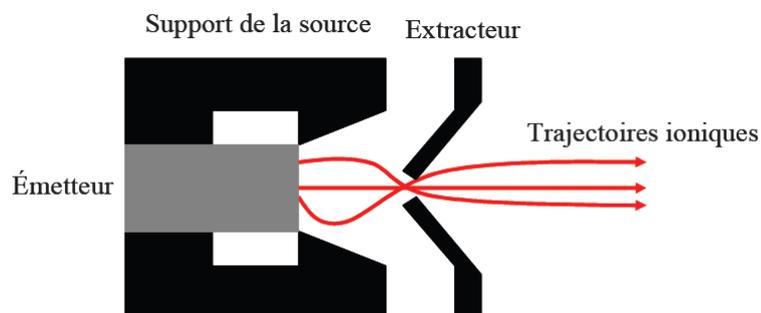


FIGURE 2.25: Coupe longitudinale de la source d'ions permettant de produire un faisceau de $1 \mu\text{A}$ d'intensité pour des énergies comprises entre 0.5 et 10 keV. La source installée sur le dispositif expérimental présente une symétrie cylindrique.

éléments du dispositif tels que les électrodes du spectromètre ou les parois de la chambre de collision. Cette collimation est faite à l'aide de deux paires de fentes réglables suivies d'un diaphragme de 2 mm de diamètre.

La figure 2.26 présente une vue de la partie mécanique du dispositif expérimental en précisant la position des différents éléments présentés ici.

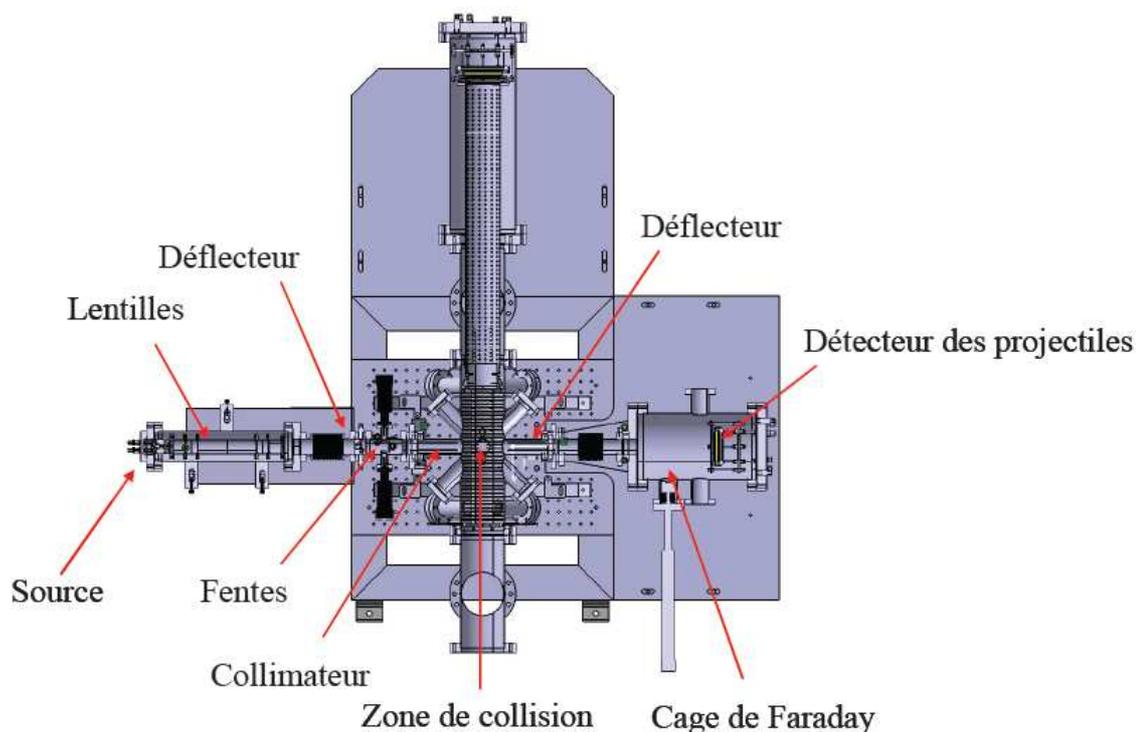


FIGURE 2.26: Coupe horizontale de la partie mécanique du dispositif expérimental présentant notamment les éléments de production, de mise en forme, d'analyse et de détection du faisceau projectile.

2.3.3 L'analyse en charge après la zone de collision

A la sortie de la chambre de collision, le faisceau projectile est analysé en charge. En effet, l'intensité du faisceau ne pouvant permettre sa détection directe, il est nécessaire de séparer les projectiles restés ioniques de ceux neutralisés lors de la collision. Cette analyse est réalisée par un déflecteur électrostatique selon l'axe (Oz) horizontal. Les ions Na^+ sont dirigés vers une cage de Faraday permettant également de mesurer l'intensité du faisceau envoyé sur la cible. Les atomes de Na sont quant-à-eux détectés par un détecteur sensible en position. La proximité des deux composantes de ce faisceau implique que la cage de Faraday, dont la position sur l'axe (Oz) est réglable, vienne se placer devant une partie du détecteur projectile.

2.4 Le système de détection

Les projectiles et les ions de recul sont détectés par des détecteurs de type MCPSPD (*Micro-channel plate position sensitive detector*) qui vont être décrits dans cette section. Le schéma d'un tel détecteur est représenté sur la figure 2.27.

2.4.1 Les détecteurs d'ions de recul et de projectiles

Les détecteurs de projectiles et d'ions de recul sont des détecteurs sensibles en position dont le principe repose sur l'utilisation de galettes à micro-canaux (MCP) suivies de deux réseaux d'anodes orthogonaux. Les particules qui arrivent sur la face avant de la première MCP déposent une partie de leur énergie en arrachant des électrons. La différence de potentiel entre les deux galettes montées en chevron permet d'accélérer les électrons secondaires produits afin qu'ils puissent à leur tour acquérir suffisamment d'énergie pour arracher d'autres électrons à l'intérieur du canal dans lequel ils se déplacent. Le gain de ces galettes est environ de 10^7 . A la sortie des galettes, la gerbe d'électrons traverse deux réseaux d'anodes orthogonaux permettant la localisation d'un évènement. Le signal déposé sur les anodes se sépare en deux et chacun de ces deux signaux migre jusqu'à l'extrémité de l'anode. La somme des temps d'arrivée d'un même signal d'origine aux deux extrémités d'une anode est directement proportionnelle à la longueur de l'anode et est donc constante :

$$T_1 + T_2 = C \quad (2.38)$$

où T_1 et T_2 sont les temps de propagation des signaux jusqu'à chaque extrémité de l'anode et C une constante. La position d'un évènement sur le détecteur est alors calculée par la différence en temps de ces deux signaux. Pour une anode dont l'enroulement se fait le long de l'axe X par exemple, la position en Y d'un évènement sera donnée par :

$$Y = T_{y_2} - T_{y_1} \quad (2.39)$$

où Y est la position en canaux et T_{y_i} les temps de détection des signaux aux extrémités de l'anode.

Caractéristiques du détecteur d'ions de recul. Le détecteur d'ions de recul est précédé de deux grilles de post-accélération permettant de communiquer aux ions de recul une énergie cinétique suffisante pour que l'efficacité de détection soit maximale. Cette accélération des ions est produite en appliquant une tension de -2 kV à la face avant de la première galette. Les

grilles permettent alors d'éviter que cette polarisation de la face avant de la première galette ne crée une lentille au sein du tube de vol libre, dégradant ainsi la résolution expérimentale. La première grille a un pas de $300 \mu\text{m}$ et une transmission de 90 % et est polarisée à la tension d'extraction et de vol libre des ions, c'est-à-dire -20 Volts. La seconde grille a un pas de $100 \mu\text{m}$, une transmission de 85 % et elle est également polarisée à -20 Volts. La première grille a été introduite dans le but d'améliorer la résolution spatiale du détecteur. En effet, la transition champ nul – champ fort entre la zone de vol libre et la zone de post-accélération conduit également à la formation de petites lentilles électrostatiques, au sein de chaque trou de la deuxième grille (de pas de 100 micromètres). Les ions de recul de basse énergie sont alors défléchis par ces micro-lentilles et viennent éclairer une zone du détecteur plus large que le pas de la grille (de l'ordre de 200 micromètres). Pour réduire cet effet, qui limite la résolution, nous avons testé une configuration comprenant deux zones de post-accélération. La première zone, entre les deux grilles, peut alors permettre d'accélérer les ions de quelques dizaines de volts, de sorte à ce qu'ils soient moins sensibles au passage de la deuxième grille. Malheureusement, cette tentative s'est soldée par un échec : pour réduire l'effet de la deuxième grille, l'accélération requise dans la première zone conduit elle aussi à une déflexion des ions de recul sur la première grille. Aucun point de fonctionnement satisfaisant n'ayant pu être trouvé, nous appliquons aux deux grilles le même potentiel.

Les galettes ont un diamètre actif de 83 mm et sont polarisées, ainsi que les anodes, à l'aide d'un pont de résistance. La galette avant est polarisée à -2 kV, la galette arrière à +400 V.

Caractéristiques du détecteur de projectiles. Le détecteur de projectiles présente une constitution très similaire à celui des ions de recul. Sur sa face avant, il ne présente qu'une seule grille, cette fois-ci polarisée positivement à +30 Volts afin de repousser des particules chargées parasites et donc de limiter le bruit de fond. Les galettes, dont le diamètre actif est ici de 40 mm, ainsi que les anodes sont polarisées comme précédemment avec un pont de résistance. La galette avant est portée à -4 kV, la galette arrière à -2 kV.

Les caractéristiques d'un détecteur de ce type ont été détaillées par Liénard *et al.* [71]. L'efficacité est d'environ 50% avec une résolution en position de $110 \mu\text{m}$ et une résolution en temps inférieure à 200 ps.

2.4.2 Le traitement logique des signaux

Le système de détection est composé d'un châssis CAMAC, d'un châssis VME et de châssis NIM pour les modules autres que ceux permettant la numérisation des signaux issus des détecteurs.

Les signaux issus des détecteurs qui viennent d'être présentés sont au nombre de dix. Pour chaque détecteur, le temps *galette* sert de temps de référence pour la détection, puis viennent les temps des deux anodes, soit quatre temps anodes par détecteur qui servent à la reconstruction de la position. Pour le détecteur d'ion de recul, la charge déposée sur la *galette* est également enregistrée. Le schéma 2.28 représente le cheminement des signaux au travers des différents modules utilisés pour l'acquisition des données brutes.

Les signaux donnant les temps des projectiles et des ions de recul sur les *galettes* et pour les anodes sont tous pré-amplifiés et inversés par un pré-amplificateur avant d'être envoyés dans des CFD (*constant fraction discriminator*) qui permettent une première sélection en ligne grâce à un seuil de détection. Seul le signal *galette* des ions de recul est préalablement divisé en deux.

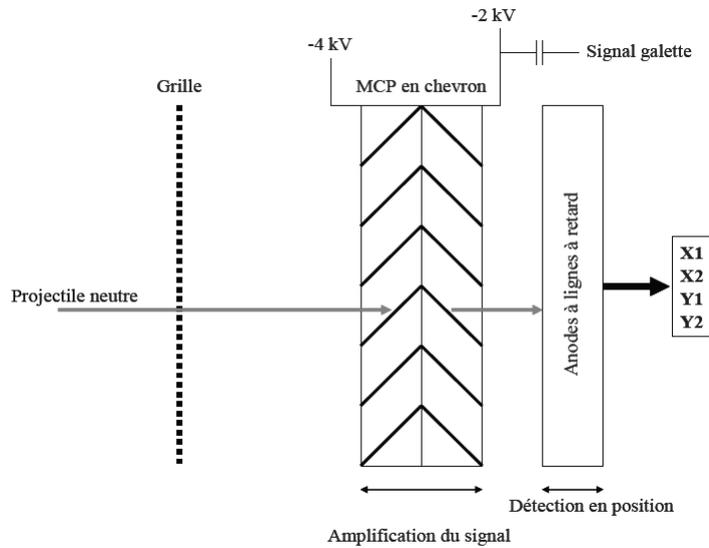


FIGURE 2.27: Schéma d'un détecteur de type MCP-PSD.

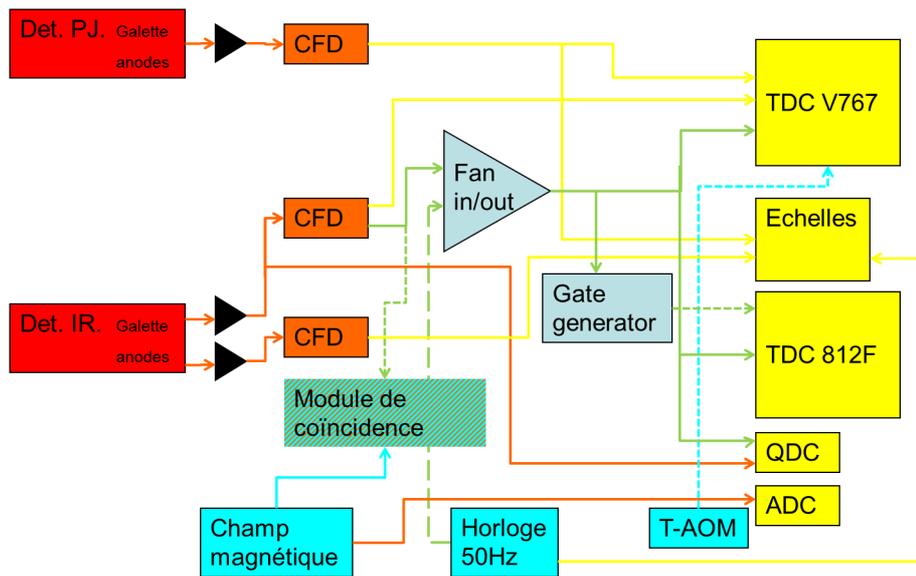


FIGURE 2.28: Schéma du système d'acquisition.

Le premier de ces deux signaux est envoyé au CFD, le second est envoyé dans un QDC (*charge digital converter*) permettant de coder la charge déposée par les ions de recul sur la *galette* et ainsi de régler le seuil de détection le plus précisément possible. En sortie du CFD, le signal *galette* est également envoyé dans un module de coïncidence avec un signal donnant l'état du champ magnétique de piégeage au moment de la détection. Cette coïncidence a été mise en place à la suite de l'expérience de collision à 0.5 keV. A cette énergie, le faisceau projectile est fortement perturbé par le champ magnétique de piégeage. L'optimisation du recouvrement entre

la cible et le faisceau projectile se fait via l'optimisation du taux de comptage des ions de recul intégré pendant les phases de piégeage (*B on*) et d'acquisition (*B off*). Sans la coïncidence, le taux de détection optimisé reflète plus l'optimisation de ce taux lorsque le champ est on, ce qui signifie que lorsque le champ est off, le faisceau projectile peut ne plus croiser parfaitement la cible. Avec la condition de coïncidence *B off*, l'optimisation est faite pour que le recouvrement soit optimal uniquement lorsque le champ B est *off*. Une rampe de tension est synchronisée avec le cycle du MOT et enregistrée par un ADC afin de connaître l'état du champ magnétique au moment du processus qui a déclenché l'acquisition. En sortie des CFD, les signaux sont envoyés vers des échelles permettant le comptage des événements ainsi que vers des TDCs pour coder les temps de chaque signal. Ce sont ces temps qui contiennent l'information qui nous permet de remonter aux observables (positions et temps de vol). Les signaux logiques donnant l'état de l'AOM_{switch} sont également codés par un TDC. Le signal galette de l'ion de recul est utilisé comme *trigger* pour déclencher l'acquisition. Une horloge de 50 Hz permet également de déclencher l'acquisition et de vérifier son bon fonctionnement. Lorsque l'acquisition est déclenchée, tous les modules sont lus. Le temps de référence est le temps de déclenchement et les signaux issus du détecteur de projectiles sont lus dans une fenêtre en temps allant de $-220 \mu\text{s}$ à $+10 \mu\text{s}$ (voir figure 2.29).

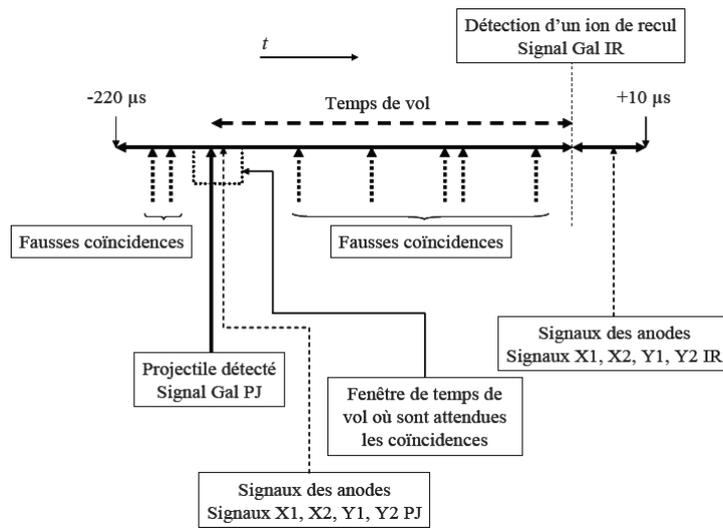


FIGURE 2.29: Fenêtre en temps ouvertes au déclenchement de l'acquisition. Les signaux provenant du projectile sont enregistrés dans une gamme de $230 \mu\text{s}$.

Le choix du bon signal projectile se fait lors de l'analyse des données en ne conservant que le signal dont le temps relatif tombe dans la fenêtre en temps de vol de l'ion de recul.

2.5 Dispositif dédié à l'étude de la capture électronique sur cible polarisée

Dans cette partie nous allons voir le principe d'orientation des atomes cible ainsi que les différents dispositifs développés et utilisés dans le but de produire des cibles orientées.

2.5.1 Principe de polarisation

L'orientation d'un atome peut conduire à une brisure de la symétrie de la distribution du nuage électronique. Les états électroniques des atomes, autres que les états s de moment angulaire nul, n'ont pas une symétrie sphérique. Néanmoins, l'orientation aléatoire de leur moment angulaire fait que, pour un grand nombre d'atomes, la probabilité de présence de l'électron actif paraît isotrope. Pour tous les états électroniques de moment angulaire $l > 0$, il est possible de briser cette isotropie, en alignant ce moment angulaire selon un axe de quantification. D'un point de vue classique, cela revient à faire tourner le nuage électronique de tous les atomes dans un même plan orthogonal à cet axe de quantification (voir figure 2.30).

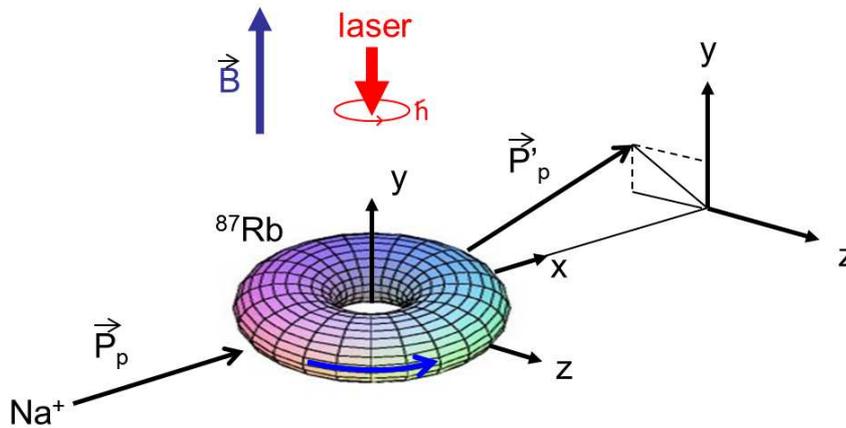


FIGURE 2.30: Représentation schématique d'une orbitale p orientée, lors d'une collision, dont le moment angulaire est dirigé selon l'axe du champ magnétique.

Néanmoins, il est important de noter que le moment angulaire électronique est couplé au moment angulaire nucléaire. Dans notre cas, les atomes de ^{87}Rb ont un moment angulaire total de $F = 2$ pour l'état fondamental s , ou $5^2S_{1/2}$, présent dans le MOT et $F = 3$ pour l'état excité $5^2P_{3/2}$. Il vient donc qu'en imposant la projection du moment angulaire total à ses valeurs maximales, $m_F = \pm 2$ pour l'état fondamental et $m_F = \pm 3$ pour l'état excité, nous allons également orienter la partie nucléaire.

L'orientation du moment angulaire total peut se faire en champ nul à l'aide d'un faisceau laser polarisé circulairement. L'axe de quantification est alors défini par les vecteurs d'impulsion des photons, c'est-à-dire la direction de propagation du faisceau laser. L'absorption des photons polarisés circulairement gauche ou droite engendre des transitions σ^- ou σ^+ permettant par pompage optique d'imposer des valeurs extrêmes à la projection m_F du moment angulaire total. En pratique, l'obtention d'un champ nul ne peut se faire que par compensation du champ magnétique terrestre. De plus, dans un MOT, le champ magnétique de piégeage peut induire des champs magnétiques résiduels lors de son *switch*, dont la caractérisation et la compensation est difficile à réaliser. Pour parer à cet effet, il est préférable possible d'imposer l'axe de quantification à l'aide d'un champ magnétique homogène orienté selon la direction de propagation des photons, suffisamment intense pour permettre de négliger les composantes dues au champ magnétique terrestre et aux champs résiduels. La figure 2.31 présente les sous niveaux Zeeman

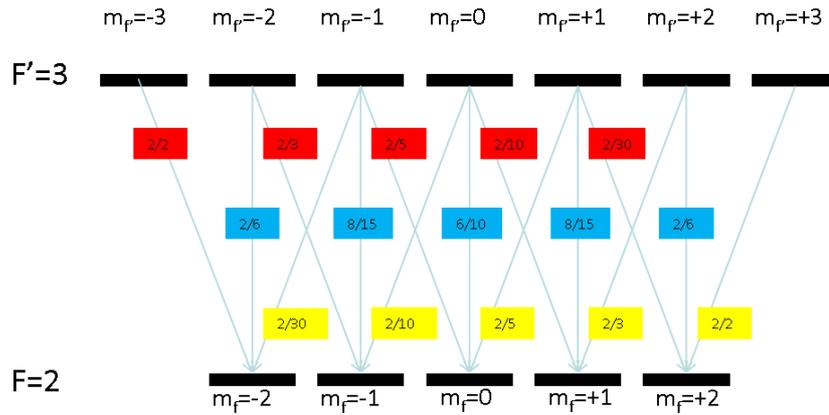


FIGURE 2.31: Schéma des sous-niveaux Zeeman de l'état fondamental $5^2S_{1/2}$ et de l'état excité $5^2P_{3/2}$. En rouge, les transitions pour lesquelles $\Delta m_F = +1$, en bleu celles pour lesquelles $\Delta m_F = 0$ et en jaune celles pour lesquelles $\Delta m_F = -1$.

peuplés lors de la polarisation pour l'état fondamental et l'état excité.

2.5.2 Montage expérimental

Dans la pratique, la polarisation d'une cible dans un piège magnéto-optique n'est pas chose aisée. En effet, pour étudier les collisions, il est nécessaire de couper le champ magnétique de piégeage. Il faudrait alors développer un autre dispositif permettant d'allumer le champ magnétique de polarisation en opposition de phase avec le précédent, or cette opération demande beaucoup de développement. La méthode choisie dans ce travail consiste à écarter la bobine supérieure du piège magnéto-optique de la zone de collision de 4 mm et de compenser le déplacement de la zone de champ nul à l'aide d'une paire de bobine supplémentaire en configuration Helmholtz. Lorsqu'on déplace la bobine de 4 mm, la zone de champ nul ne se déplace que de 2 mm car elle reste équidistante des deux bobines. Lors de la commutation du champ magnétique de piégeage, les bobines de correction restent allumées et produisent un champ magnétique homogène d'environ 4 Gauss au centre de la chambre de collision.

Pour ce qui est du faisceau laser, c'est l'ordre 0 qui traverse l'AOM_{switch} qui est récupéré puis envoyé dans un autre AOM. La fréquence appliquée à cet AOM est la même que celle de l'AOM_{switch}, c'est-à-dire 110 MHz. L'ordre -1 est donc directement à la fréquence adéquate pour faire transiter l'électron actif du niveau $5^2S_{1/2}$, $F = 2$ vers l'état excité $5^2P_{3/2}$, $F' = 3$. Un télescope permet d'élargir légèrement ce faisceau afin que ces dimensions soient supérieures à celles du nuage. L'intensité du faisceau peut ensuite être ajustée à l'aide d'un couple lame demi-onde et cube polariseur, avant que celui-ci ne soit polarisé circulaire gauche (CG) ou circulaire droite (CD) par une lame quart d'onde. Enfin, ce faisceau est envoyé selon l'axe vertical colinéaire au champ magnétique homogène produit pour l'orientation. La figure 2.33 schématise ce dispositif expérimental.

L'autre difficulté inhérente à l'orientation des atomes dans un MOT vient de l'interaction des atomes avec le faisceau laser. Comme pour le piégeage, les atomes qui absorbent des photons issus du laser subissent une force qui va les chasser hors de la zone de collision. Pour parer à cela, un miroir a été ajouté à la sortie de la chambre de collision pour rétro-réfléchir le faisceau laser

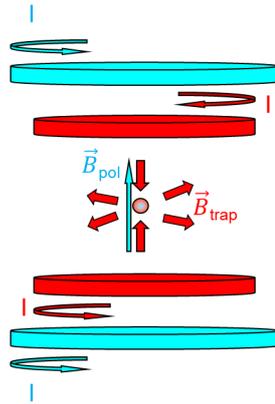


FIGURE 2.32: Configuration des deux paires de bobines, l’une en configuration anti-Helmholtz pour le piégeage et l’autre en configuration Helmholtz pour compenser le déplacement de la zone de champ nul et pour délivrer un champ magnétique homogène servant à imposer l’axe de quantification.

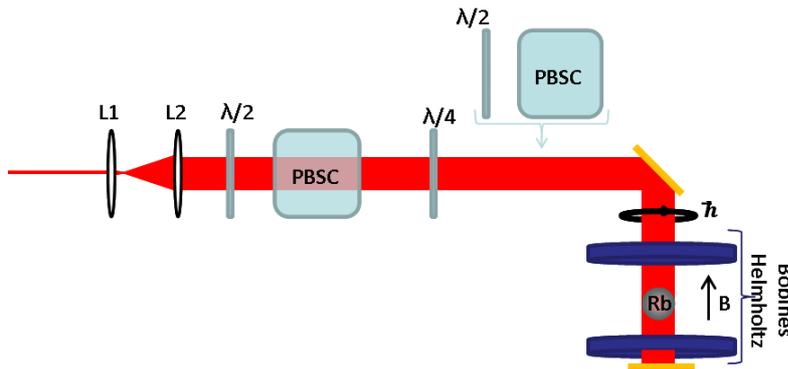


FIGURE 2.33: Représentation schématique du dispositif de polarisation des atomes froids.

et ainsi équilibrer les forces exercées sur les atomes. L’intensité du faisceau est alors ajustée de sorte à ne pas dégrader le nuage cible, tout en assurant le pompage optique nécessaire à l’orientation et en plaçant une fraction d’atomes suffisamment importante dans l’état excité. L’intensité typique du laser de polarisation au cours de ces expériences était de l’ordre de 5 mW/cm^2 . Un couple lame demi-onde et PBS peut également être inséré sur le trajet du faisceau afin d’analyser la circularité de la polarisation.

2.5.3 Caractérisation de la cible polarisée

Nous avons également souhaité caractériser l’état de polarisation de la cible ainsi préparée par notre dispositif expérimental dans le but de pouvoir comparer quantitativement les résultats obtenus pour la capture avec cette cible aux résultats des calculs MOCC. Cette caractérisation s’est faite en deux étapes, la première vise à mesurer le taux de polarisation des atomes dans le nuage et la seconde à mesurer le temps nécessaire pour atteindre un régime stationnaire. Cette dernière mesure est nécessaire car si le temps de polarisation est trop long, le nuage d’atomes

froids aura disparu avant que la mesure ne soit réalisable. Le temps pendant lequel le nuage peut être laissé libre, sans que sa densité ne devienne trop faible, est de l'ordre de quelques ms, il faut donc que le temps de polarisation soit au moins inférieur à la ms.

Taux de polarisation. Le taux de polarisation a été mesuré à l'aide d'un dispositif très simple constitué de notre caméra CCD, d'une lame $\lambda/2$ et d'un cube polariseur. Les photons émis par une cible orientée ont des caractéristiques bien particulières. Le long de l'axe de quantification, les transitions σ , pour lesquelles $m_F^f - m_F^i = \Delta m_F = \pm 1$, donnent lieu à l'émission de photons de polarisation circulaire et les transitions π , $\Delta m_F = 0$, à des photons de polarisation linéaire. En revanche, dans le plan transverse à l'axe de quantification, celui où se trouve notre caméra CCD, les photons issus de transitions σ ou π ont une polarisation linéaire mais orthogonale entre elles. La polarisation des photons issus des transitions π sera colinéaire à l'axe de quantification tandis que celle des photons issus de transitions σ leur sera orthogonale (voir figure 2.34). Le couple composé de la lame demi-onde et du PBSC permet de sélectionner les photons que l'on souhaite observer avec la caméra. Si l'on se réfère à la figure 2.31, lorsque la cible est totalement orientée, seules doivent avoir lieu des transitions σ . En intégrant le nombre de photons détectés pour chacune des polarisations sélectionnées, on peut remonter à la proportion d'atomes dans les sous niveaux Zeeman extrêmes ou dans les autres sous niveaux Zeeman. Le schéma de ce dispositif est présenté sur la figure 2.34. Nous avons obtenu un pourcentage de photons polarisés selon la direction orthogonale à l'axe de quantification supérieur à 96%. Ce résultat montre que le nuage d'atomes est presque parfaitement orienté.

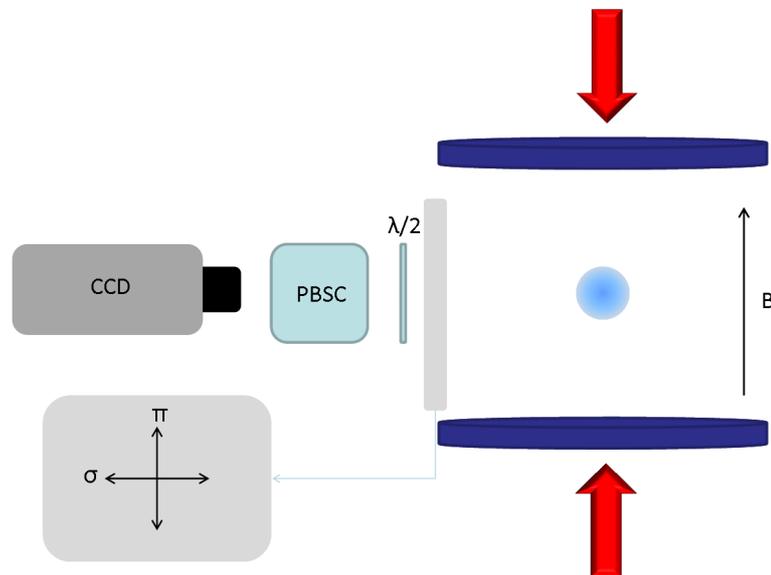


FIGURE 2.34: Représentation schématique du dispositif permettant d'accéder au taux de polarisation de la cible.

Le temps d'intégration minimal de la caméra CCD ($132 \mu\text{s}$) et sa sensibilité ne nous a pas permis de mesurer la vitesse de polarisation avec cette méthode. C'est pourquoi un second dispositif a été développé pour cette mesure.

Vitesse de polarisation. Ce dispositif est basé sur le taux d'absorption des photons d'un nouveau faisceau laser par les atomes du nuage en fonction de différents temps de polarisation. Le faisceau sonde utilisé ici est accordé sur la transition $5^2S_{1/2}, F = 2 \rightarrow 5^2P_{3/2}, F' = 2$. Pour cette transition, les sous niveaux Zeeman sont tels que $-2 \leq m_F \leq +2$, si bien qu'un faisceau laser sonde polarisé de la même façon que le faisceau laser de polarisation du nuage verra son absorption par le nuage diminuer à mesure que celui-ci se polarise. En effet, pour un laser pompe induisant des transitions σ^+ , lorsque les atomes s'accablent sur les niveaux $5^2S_{1/2}, F = 2, m_F = +2$ et $5^2P_{3/2}, F' = 3$, on voit (figure 2.35) qu'il n'existe pas de transitions σ^+ associées à la fréquence du laser sonde : le nuage devient donc transparent pour ce laser.

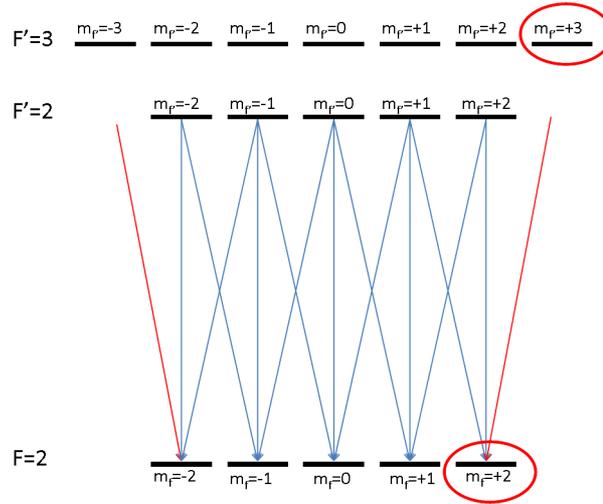


FIGURE 2.35: Schéma des transitions utilisées pour déterminer la vitesse de polarisation de la cible avec notre dispositif de polarisation.

Pour réaliser ce dispositif (figure 2.36), nous avons utilisé le faisceau laser pompe du dispositif d'absorption saturée permettant la stabilisation en fréquence du laser de piégeage. Ce laser, accordé sur la transition $5^2S_{1/2}, F = 2, m_F = +2$ vers le *cross-over* $5^2P_{3/2}, F' = 2 - 3$, est envoyé dans un AOM dont la fréquence de modulation est de 133 MHz. Ensuite, il est juxtaposé au faisceau laser de polarisation de manière à ce qu'ils se croisent au niveau du nuage d'atomes. Il subit donc le même traitement que le laser de polarisation. Lorsqu'il est rétro-réfléchi, une partie est séparée du chemin initial par le cube polariseur. C'est ce faisceau que l'on détecte avec une photodiode. Le faisceau de polarisation est déclenché de manière à polariser la cible puis après son extinction, le faisceau sonde est envoyé pour mesurer l'absorption. Le profil d'absorption est mesuré pour différents temps de polarisation. Lorsque ce profil n'évolue plus, on en déduit que les atomes sont orientés avec un taux égal à celui trouvé précédemment. Les différents profils d'absorption du laser sonde sont visibles sur la figure 2.37. Le temps de polarisation nécessaire déterminé ici est d'environ $5 \mu s$.

2.6 Les séquences en temps utilisées pour les faisceaux lasers

Comme nous l'avons vu, les données permettant d'avoir une haute résolution sur l'impulsion de l'ion de recul sont acquises lorsque le champ magnétique de piégeage est éteint. Durant cette

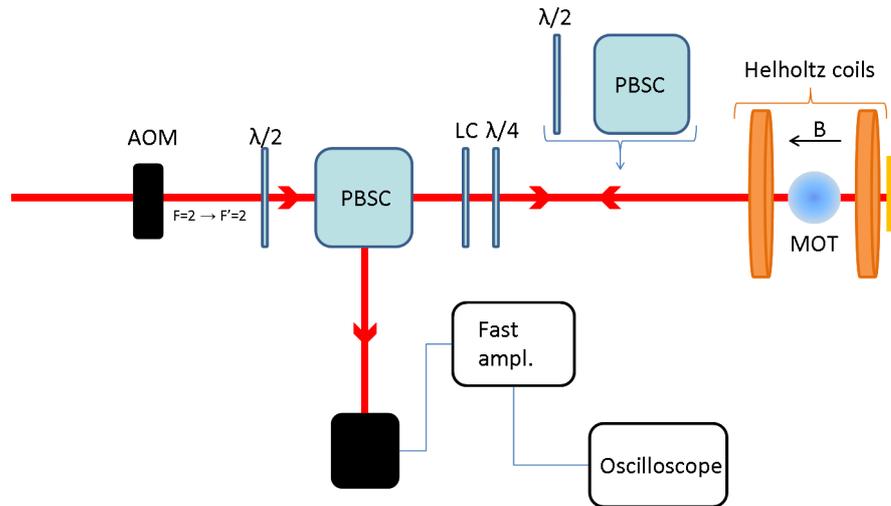


FIGURE 2.36: Schéma de principe du dispositif permettant de mesurer la vitesse de polarisation des atomes par notre dispositif de polarisation.

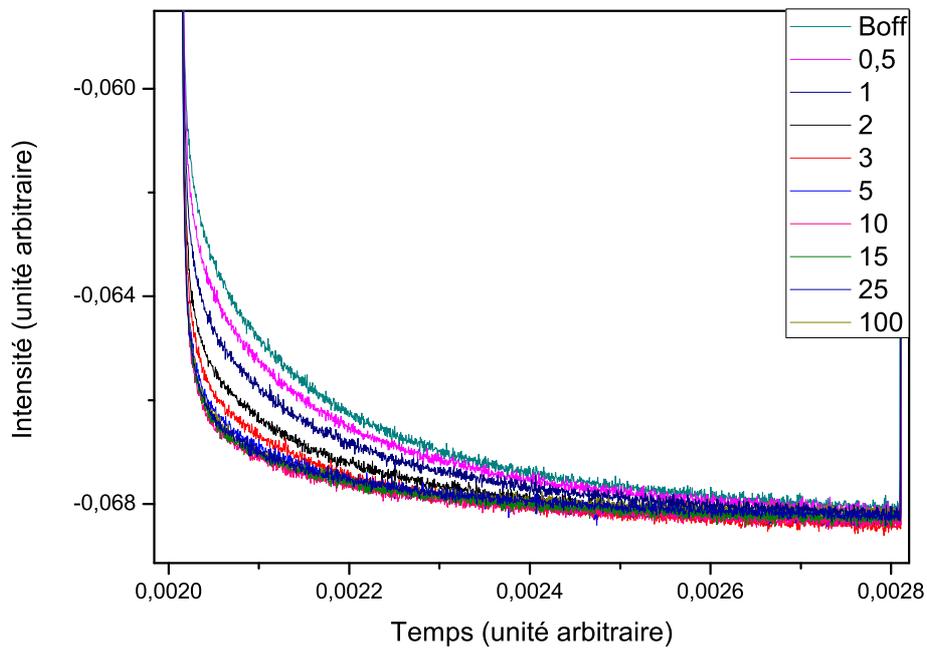


FIGURE 2.37: Profils d'absorption du faisceau sonde pour différents temps de polarisation (donnés en μs sur la figure). Lorsque ce temps de polarisation dépasse $5 \mu\text{s}$ le profil d'absorption n'évolue plus, ce qui indique que les atomes du nuage sont orientés.

période, les lasers du dispositif optique sont utilisés pour produire des cibles dans différents états. Dans un premier temps, nous avons réalisé des expériences sur cible dans l'état fondamental

ou excité. Ensuite nous avons produit des cibles alignées. Nous allons maintenant présenter les séquences en temps envoyées aux lasers.

Lors des expériences sur cible dans les états fondamental et excité, la seule contrainte à respecter est l'équivalence du recouvrement entre le faisceau projectile et la cible lorsqu'elle se trouve dans l'état fondamental ou dans un mélange de ces deux états. Nous avons vu que cette condition nous permet d'accéder aux rapport des sections efficaces relatives ainsi qu'à la fraction excitée d'atomes dans le nuage. Pour ces raisons, nous avons choisi une commutation rapide des faisceaux lasers de piégeage, avec une période de $100 \mu s$.

Lors des expériences avec des cibles orientées, l'enjeu était différent. Le but était d'orienter les cibles suffisamment rapidement pour acquérir des données une fois la cible orientée et de porter une grande fraction des atomes du nuage dans l'état excité car les collisions sur cibles orientées dans un état s n'apportent aucune information supplémentaire. Cette fois, nous avons donc choisi une séquence où le laser de polarisation est allumé en continu pendant une période de 1.9 ms . En début et en fin de cycle, nous avons également allumé les lasers de piégeage afin de disposer de données avec cible excitée mais non orientée. Comme nous le verrons dans la section suivante, ces dernières sont utilisées à des fins de calibration. Cette séquence est représentée sur la figure 2.38.

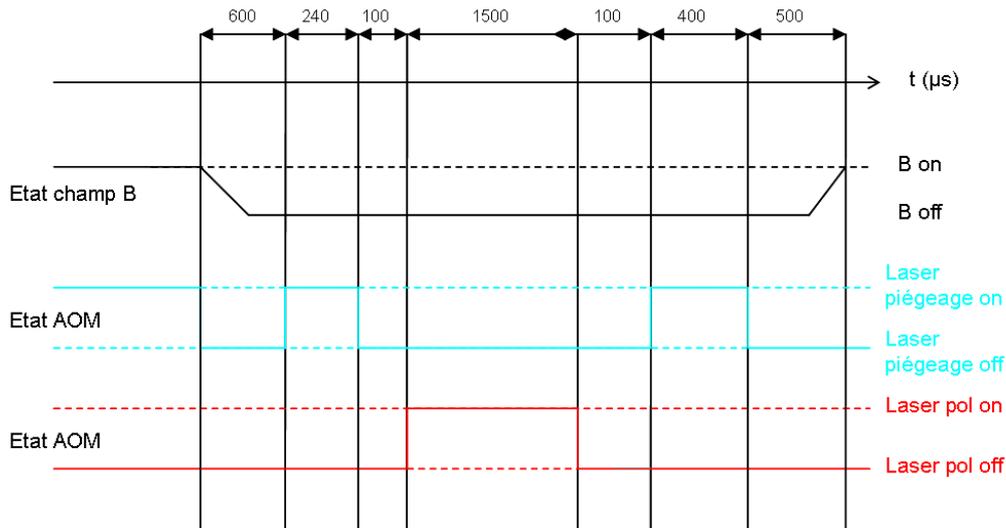


FIGURE 2.38: Séquence logique permettant d'allumer et d'éteindre les différents faisceaux lasers dans la chambre de collision lors de la phase d'acquisition.

Chapitre 3

Analyse des données

A la suite de l'expérience, les données brutes collectées lors de l'acquisition n'apportent pas directement d'information physique. L'analyse de ces données est l'étape essentielle qui va permettre de reconstituer les observables pertinentes du processus étudié et de *nettoyer* le plus proprement possible les résultats de toutes les sources de bruit de fond présentes.

Ce chapitre va exposer les différentes sélections et reconstructions faites afin de déterminer le plus précisément possible les sections efficaces relatives et différentielles de chaque voie de capture. Cette présentation se fera dans l'ordre dans lequel les événements ont été traités, ce qui implique qu'une distribution donnée sera présentée en tenant compte des conditions imposées précédemment.

1 Filtres sur les données brutes

1.1 Filtres sur le temps de vol des ions de recul

La première étape d'analyse est la lecture des fichiers de données binaires fournis par le système d'acquisition. Lors de cette lecture des données brutes, les événements sont classés et quelques conditions, peu restrictives sont appliquées. Pour chaque événement enregistré le système d'acquisition fournit les temps *galette* associés à l'ion de recul et aux projectiles détectés. Ensuite viennent les temps issus des anodes, puis la charge déposée par les ions de recul sur la galette à micro-canaux (MCP) et des observables caractéristiques de l'état du champ magnétique et des lasers dans la chambre de collision au moment de l'enregistrement.

La première sélection effectuée est une condition sur les temps de détection des projectiles et de l'ion de recul. Le TOF des ions de recul reconstruit est la différence en temps de détection, par les MCPs, des projectiles et de l'ion de recul.

$$TOF_{IR} = T_{IR}^{galette} - T_{PJ}^{galette} \quad (3.1)$$

Comme vu précédemment, le TDC utilisé pour le détecteur projectile est *multi-hits*, et l'on peut donc détecter plusieurs projectiles dans la fenêtre de coïncidence ouverte par la détection d'un ion de recul. Dans cette première sélection, nous ne conservons que les données pour lesquelles les temps de vol, TOF_{IR} est dans la fenêtre attendue. Cette fenêtre en TOF est montrée sur la figure 3.1. On y observe un pic caractéristique en temps de vol des ions de recul corrélés avec leurs projectiles respectifs.

Les principales sources de bruit de fond seront soustraites le plus proprement possible par la suite après avoir été identifiées et caractérisées. Les MCPs génèrent leur propre source de bruit de fond, très homogène, en position, tant pour les ions de recul que pour les projectiles. Cette source de bruit de fond est très faible (quelques dizaines de coups par seconde) et peut être caractérisée lorsque le MOT ainsi que le faisceau projectile sont éteints. Lors des expériences, les taux de comptages relatifs aux ions de recul et aux projectiles sont respectivement de l'ordre de 1 kHz et 2.5 kHz dans la fenêtre d'intérêt du cycle du MOT, c'est-à-dire lorsque le champ magnétique quadrupolaire de piégeage est éteint. Avec ces taux de comptage élevés, une autre source de bruit de fond importante provient donc des *fausses coïncidences* pour lesquelles le projectile et l'ion de recul détectés ne sont pas corrélés. Cette contribution s'étale de manière faiblement décroissante sur toute la gamme en temps de vol. La condition appliquée précédemment sur le TOF limite de façon drastique la contribution des *fausses coïncidences*, la réduisant au plateau visible sur la figure 3.1.

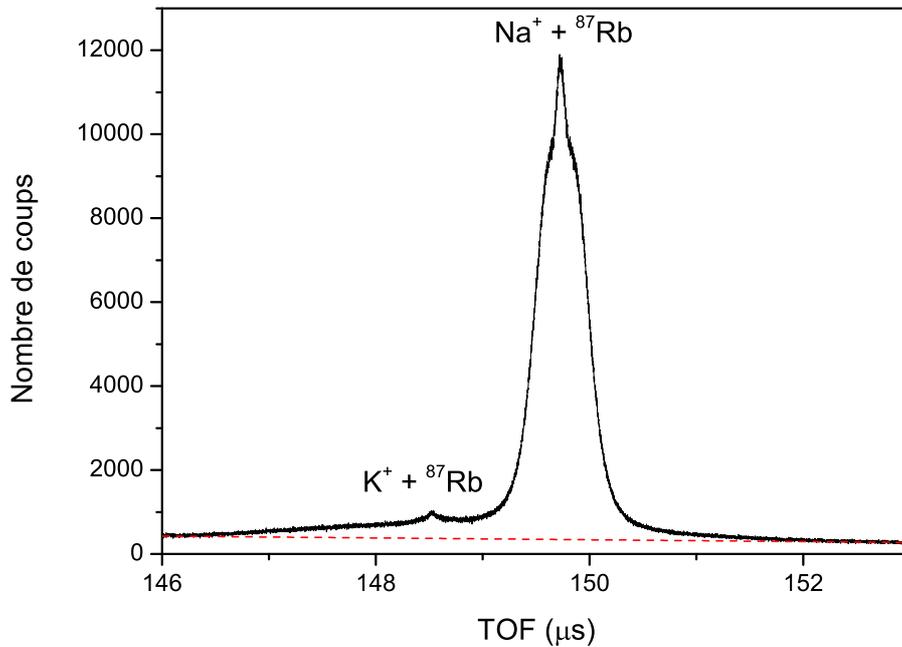


FIGURE 3.1: Distribution des évènements en temps de vol pour une énergie cinétique du projectile de 2 keV. Les *vraies* coïncidences forment un pic sous lequel s'étale une distribution quasi-constante de bruit de fond. On observe également un pic issu d'évènements de capture pour des collisions $K^+ + {}^{87}\text{Rb}$, en effet la source produit également en faible proportion des polluants K^+ .

1.2 Reconstruction et filtres des temps des MCPs et des anodes

Afin d'exclure proprement un maximum d'évènements de bruit de fond il est possible d'appliquer des filtres sur les différents temps issus des lignes à retard et des MCPs. En effet, comme décrit dans la partie expérimentale, les lignes à retard utilisent la différence de temps

d'arrivée du signal à chacune de leurs extrémités afin de localiser un évènement. Il vient donc que la somme des temps pour un même évènement doit être constante et proportionnelle à la longueur de l'anode utilisée. Les évènements pour lesquels la somme de ces temps n'est pas dans la fenêtre attendue (figure 3.2) sont rejetés.

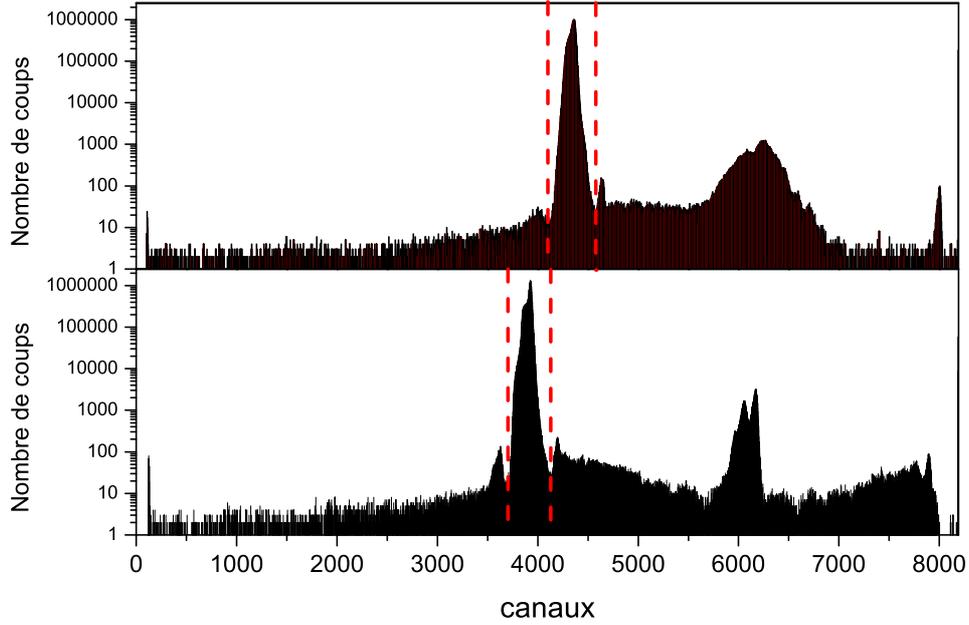


FIGURE 3.2: Distributions de la somme des temps de la ligne à retard donnant la position en X (haut) et de celle donnant la position en Y (bas). Les fenêtres de sélection sont indiquées par des lignes verticales.

Ces sélections sont effectuées pour les deux anodes du détecteur d'ion de recul ainsi que pour les deux anodes du détecteur projectile.

2 Reconstruction et filtres des observables

Après avoir procédé à cette première sélection des données, il reste à reconstruire les observables expérimentales, les filtrer et les trier avant de pouvoir obtenir finalement les sections efficaces relatives, la valeur de la fraction excitée et les distributions en angle de diffusion du projectile. Dans les paragraphes qui vont suivre, c'est l'ensemble de ce traitement des données qui va être exposé.

2.1 Position du projectile

Après le temps de vol des ions de recul, ce sont les positions des ions de recul et des projectiles qui sont reconstruites. Toute l'information concernant la dynamique de la collision est contenue

dans le temps de vol des ions de recul et dans leurs positions sur les MCPs, mais les positions relatives aux projectiles permettent de nettoyer les données.

Le fonctionnement des lignes à retard décrit au chapitre précédent donne la méthode de reconstruction de la position à partir des temps d'arrivée d'un même signal à l'extrémité de chaque anode. La figure 3.3 représente la distribution bidimensionnelle des évènements détectés par le détecteurs de projectile. Cette distribution est déjà conditionnée par les filtres précédents. La tâche plus intense, centrée verticalement et décalée vers la gauche du détecteur correspond aux projectiles neutralisés qui n'ont pas subi l'effet du déflecteur électrostatique. Ce sont ces évènements qui vont nous intéresser car la majorité d'entre eux proviennent d'une capture électronique sur un atome de rubidium de la cible froide du MOT. La coupure effectuée ici est purement géométrique : des bornes verticales et horizontales ont été définies autour de la zone d'intérêt.

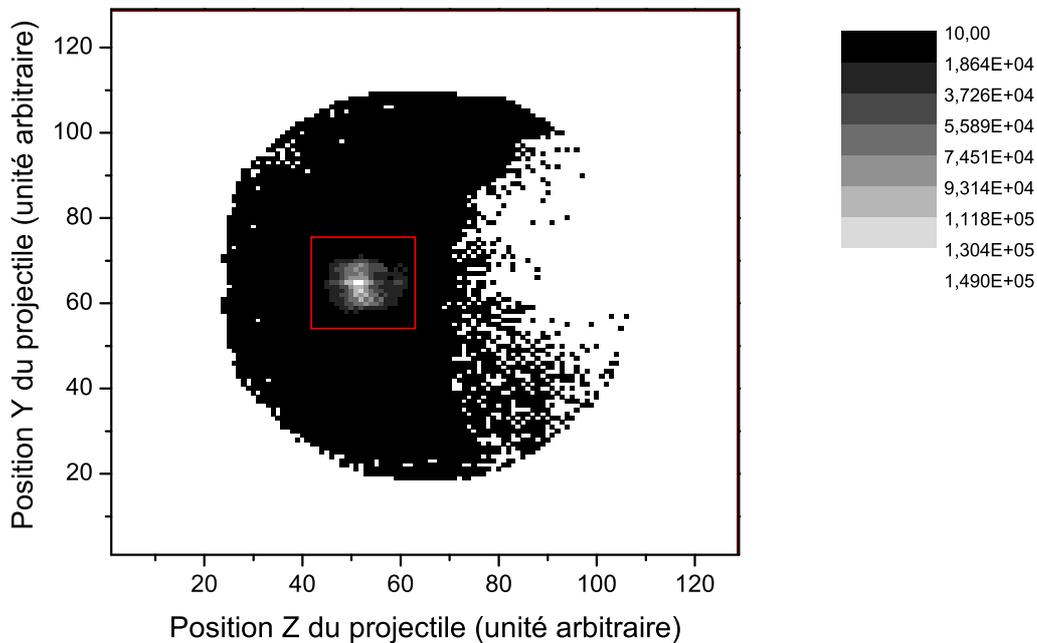


FIGURE 3.3: Distribution bidimensionnelle des évènements sur le détecteur projectile. Le filtre d'analyse est représenté en rouge autour de la zone d'intérêt.

Sur cette distribution, il est également possible de noter que le bruit à droite du détecteur est beaucoup moins important. Cet effet est la conséquence de la cage de Faraday placée devant le détecteur qui ombrage une partie du détecteur.

2.2 Sélection des évènements sans champ magnétique

Le déroulement de toutes les expériences a été automatisé : le dispositif suit un cycle de piégeage de 9 ms suivi d'une phase d'acquisition de données sans champ magnétique de 3 ms, comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent. Néanmoins, la détection se fait tout au long

du cycle. C'est la raison pour laquelle une rampe de tension 0/ + 5 Volts, synchronisée avec ce cycle, a été ajoutée afin de permettre la sélection des événements exploitables lors de l'analyse. En effet, lorsque le champ magnétique est présent, on peut observer une forte distorsion de la trajectoire des ions de recul, ce qui engendre une perte importante de la résolution expérimentale. Sur la figure 3.4, on voit l'effet du champ magnétique sur l'image dans les directions X et Y du détecteur d'ion de recul.

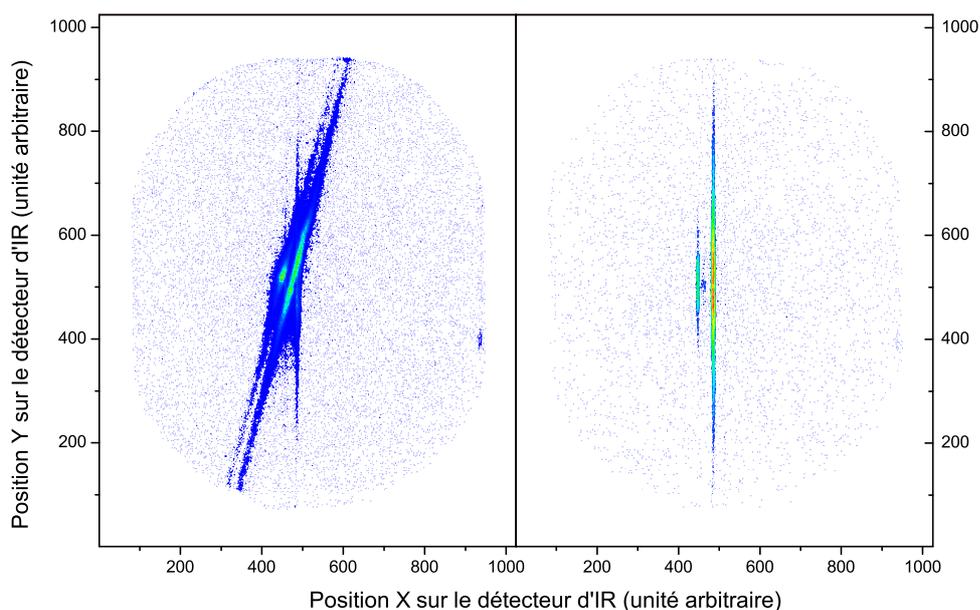


FIGURE 3.4: Image du détecteur d'ion de recul lorsque le champ magnétique est présent dans la chambre de collision (gauche) et lorsque le champ magnétique est éteint (droite).

3 Correction des effets systématiques

En plus du filtrage des événements, le programme d'analyse permet également de corriger les effets systématiques. Ainsi, on peut déterminer l'angle entre les axes X et Y liés au repère de la collision et ceux du détecteur afin de corriger précisément ces distributions par une simple rotation des axes du détecteur (voir figure 3.5).

De même, pour repérer et corriger d'éventuelles dérives en position ou en temps de vol sur le détecteur d'ions de recul, les observables X, Y et le TOF sont représentées en fonction du temps dans le cycle d'acquisition et en fonction du nombre d'événements qui joue ici le rôle de *temps* absolu. Ces dérives peuvent être la conséquence de champs magnétiques résiduels après la commutation du champ magnétique de piégeage, d'un léger changement de position ou de densité du nuage, ou de certaines dérives en tensions, notamment la tension d'extraction du spectromètre. Les dérives observées n'ont pas un impact important sur les observables phy-

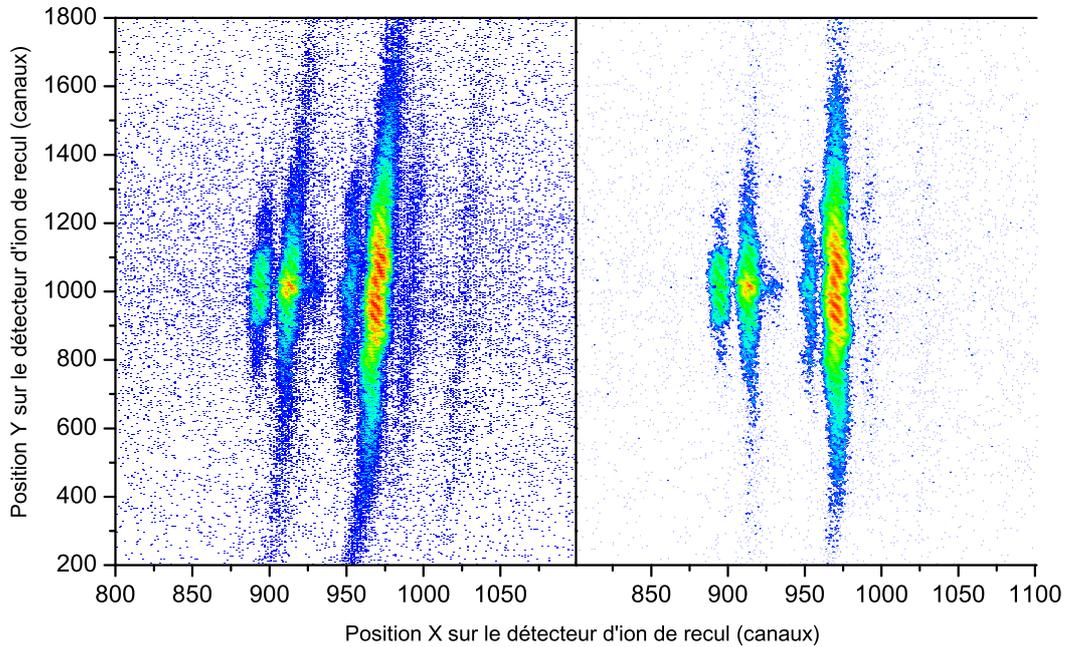


FIGURE 3.5: Illustration de la rotation des distributions sur le détecteur d'ion de recul.

siques reconstruites. En revanche, elles peuvent engendrer des erreurs lors de la sélection des événements et dégrader la résolution.

4 Sélection de l'état de la cible

4.1 Expérience sur cible dans le fondamental ou excitée

Cette nouvelle étape franchie, il est maintenant possible d'obtenir les distributions des ions de reculs en sélectionnant l'état de la cible. Cette sélection est une étape importante car elle permet d'obtenir simplement les sections efficaces relatives pour les collisions $\text{Na}^+ + {}^{87}\text{Rb}(5s) \rightarrow \text{Na}(n'l') + {}^{87}\text{Rb}^+$. La figure 3.6 montre que ces différents canaux sont bien résolus par notre dispositif expérimental.

D'autre part, cette discrimination permet de remonter à la fraction excitée du nuage d'atomes froids, c'est-à-dire à la proportion d'atomes portés dans l'état excité lorsque les lasers sont allumés. En observant la figure 3.7, qui correspond à la sélection des événements lorsque la cible est dans un mélange $\text{Rb}(5s,5p)$, on s'aperçoit que la déconvolution, permettant d'obtenir les sections efficaces relatives pour des canaux de capture à partir du $\text{Rb}(5p)$ peut s'avérer difficile. La commutation rapide des lasers dans la chambre de collision nous permet de faire l'hypothèse que la densité de la cible (le nombre d'atomes pouvant interagir avec le faisceau projectile) est identique lorsque les lasers sont allumés ou éteints dans la chambre de collision. Il suffit alors de retrancher au spectre en X des événements *laser on* une contribution du spectre en X *laser off*.

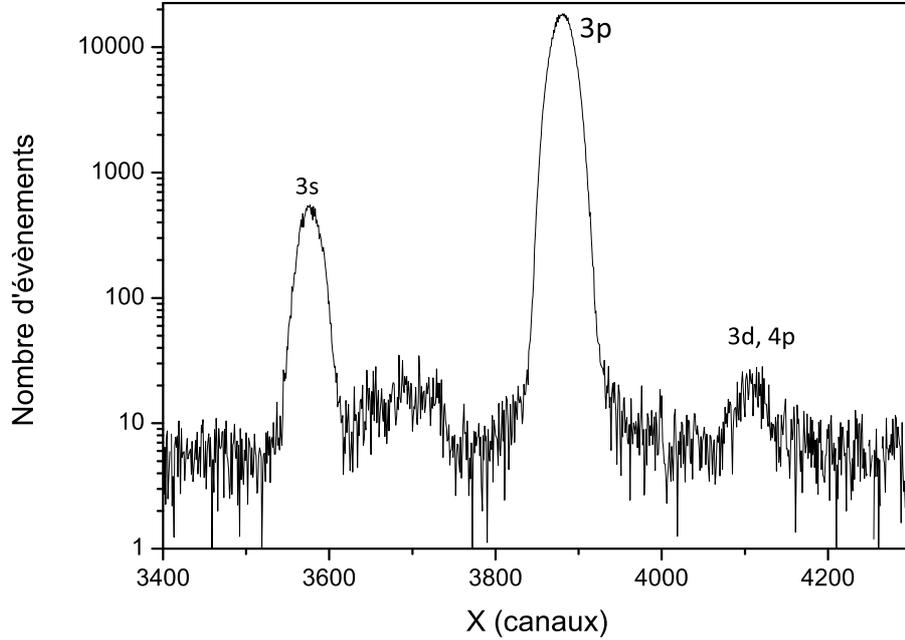


FIGURE 3.6: Exemple d'une distribution sur l'axe X, colinéaire au faisceau projectile incident, permettant d'obtenir les sections efficaces relatives pour les différents Q de réaction lorsque la cible est dans son état fondamental. L'état peuplé sur le projectile est indiqué sur la figure.

$$A_s^{exc} = A_s^{on} - \alpha \cdot A_s^{off} \quad (3.2)$$

où le coefficient α est le complémentaire de la fraction excitée d'atome dans le nuage :

$$f = 1 - \alpha \quad (3.3)$$

La valeur de ce paramètre α est déterminée en annulant statistiquement une contribution *non polluée* par des événements provenant d'une cible dans son état fondamental sur la distribution en X lorsque les lasers sont allumés. Pour cette soustraction, c'est une partie de la distribution en X de la transition $\text{Rb}(5s) \rightarrow \text{Na}(3s)$ qui est utilisée. Cette procédure est illustrée sur la figure 3.11 en fin de chapitre.

Lors des différentes expériences, la cible a été préparée dans des états bien définis à l'aide de faisceaux lasers. Lors des expériences sur cible non orientée, le signal logique permettant de contrôler l'état des lasers de piégeage qui produisent des cibles dans l'état excité est enregistré par un TDC. La capture à partir de cet état excité du rubidium donne lieu à des Q de réaction différents de ceux obtenus avec une cible dans l'état fondamental. Sur le détecteur d'ions de recul, cela se traduit par des franges verticales colinéaires à l'axe Y, dont la position en X est caractéristique d'une voie de capture. En représentant la distribution en X des événements en fonction du temps codé donnant l'état des AOMs, comme sur la figure 3.8, il est possible de discriminer les événements provenant d'une cible dans son état fondamental ou dans un mélange

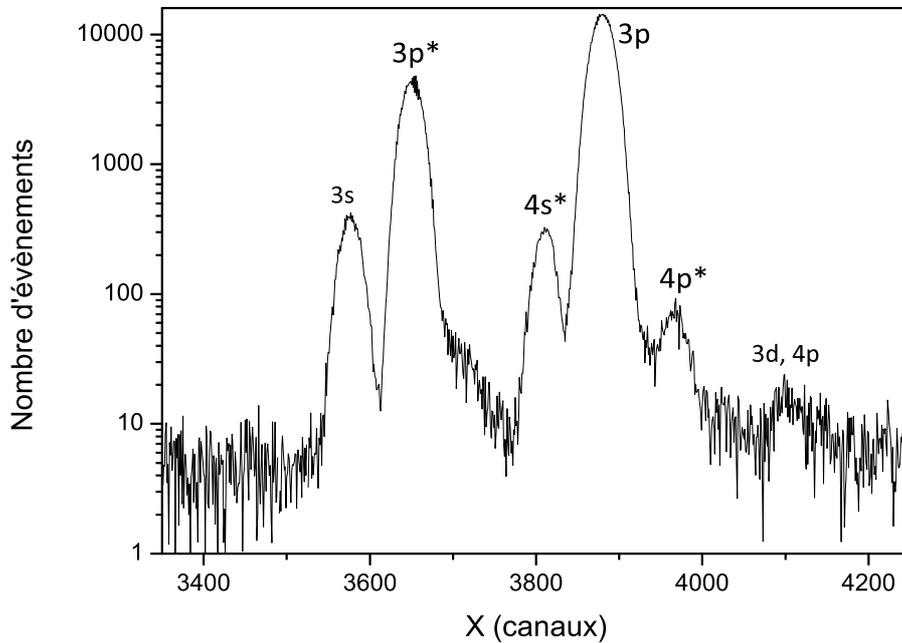


FIGURE 3.7: Exemple d'une distribution sur l'axe X, colinéaire au faisceau projectile incident, permettant d'obtenir les sections efficaces relatives pour les différents Q de réaction lorsque la cible est composée d'un mélange d'atomes dans leur état fondamental et dans leur état excité. L'état peuplé sur le projectile est indiqué sur la figure. L'astérisque indique une capture à partir de l'état $5p$ du rubidium.

d'états fondamental et excité.

Lorsque les lasers sont éteints, seules les raies caractéristiques des transitions $\text{Rb}(5s) \rightarrow \text{Na}(3s, 3p, 3d)$ sont visibles alors que quand les lasers sont allumés s'ajoutent les raies correspondantes aux transitions électroniques $\text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(3p, 4s, 4d)$. La limite permettant de discriminer les états de la cible peut être fixée de façon très précise, car le temps caractéristique pour que la cible atteigne l'équilibre après que l'on ait allumé ou éteint les lasers est de l'ordre de grandeur de la dizaine de nanosecondes.

4.2 Cible orientée

Pour les expériences sur cible orientée, la séquence en temps des lasers étant différente, la sélection des événements associés aux différents états de la cible est faite à l'aide d'une autre observable. C'est l'apparition des raies caractéristiques, en Q de réaction, de processus de capture à partir de l'état $5p$ du rubidium qui va nous renseigner sur l'état des lasers. Cette fois, la distribution en X des ions de reculs sera observée en fonction de l'amplitude de la rampe synchronisée avec le cycle du champ magnétique. On voit (figure 3.9) l'apparition des raies caractéristiques des Q de réactions correspondant aux événements de capture électronique à partir du $\text{Rb}(5p)$ lorsque les lasers de piégeage ou le laser de polarisation sont allumés.

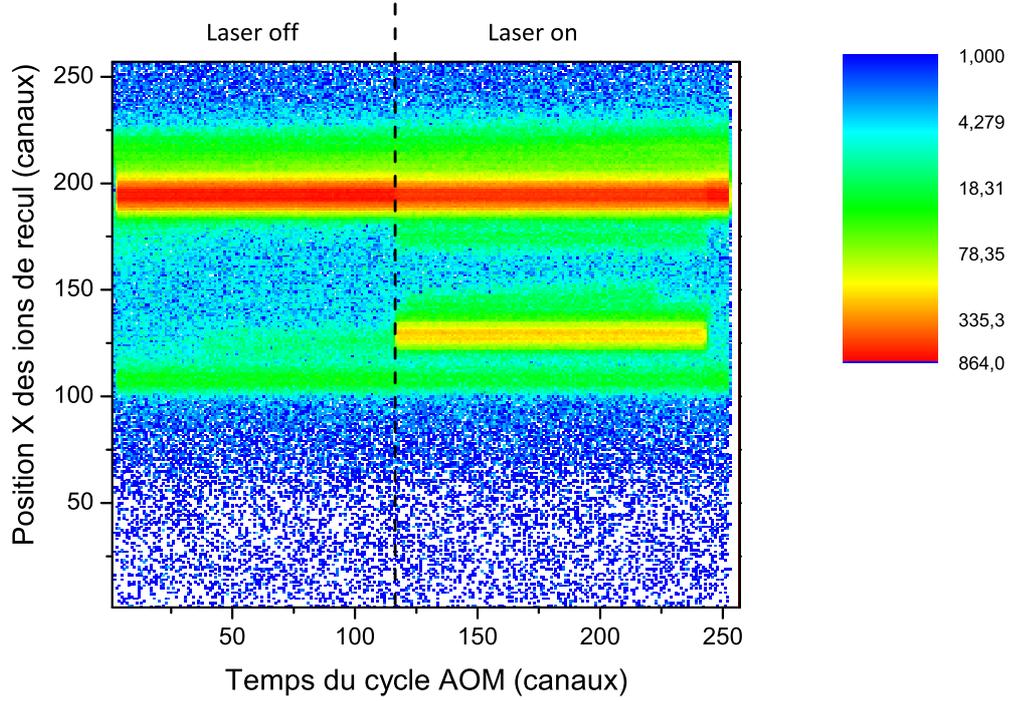


FIGURE 3.8: Distribution en X des ions de reculs en fonction du temps codé pour les AOMs. L'apparition de nouvelles franges en X indique que de nouvelles transitions existent, ce sont les transitions dont l'état de départ est le Rb(5p).

5 Détermination du vecteur impulsion de l'ion de recul

Les distributions en X des ions de recul permettent d'étalonner très précisément notre dispositif expérimental grâce aux Q de réactions calculés à partir des niveaux d'énergie peuplés sur la cible et le projectile. On obtient la formule suivante :

$$Q(X) = A_{//}X(\text{canaux}) + B \quad (3.4)$$

Le coefficient $A_{//}$ traduit la proportionnalité entre la position en X des ions de reculs sur le détecteur et le Q de réaction et B est une constante. Par la suite, nous verrons que la composante Y de l'impulsion de l'ion de recul sera déterminée à l'aide de ce même paramètre $A_{//}$.

Après cet étalonnage en Q de réaction (équation 3.4), on déduit que :

$$P_{//} = P_X = - \left(\frac{Q(X)}{v_p} + \frac{v_p}{2} \right) = a_{//}X + b \quad (3.5)$$

où $a_{//} = -\frac{A_{//}}{v_p}$ et b une constante. La symétrie cylindrique du spectromètre nous permet d'utiliser le coefficient $a_{//}$ pour déterminer la composante de l'impulsion selon l'axe Y à partir des positions relatives en canaux par :

$$P_Y = a_{//}(Y - Y_0) \quad (3.6)$$

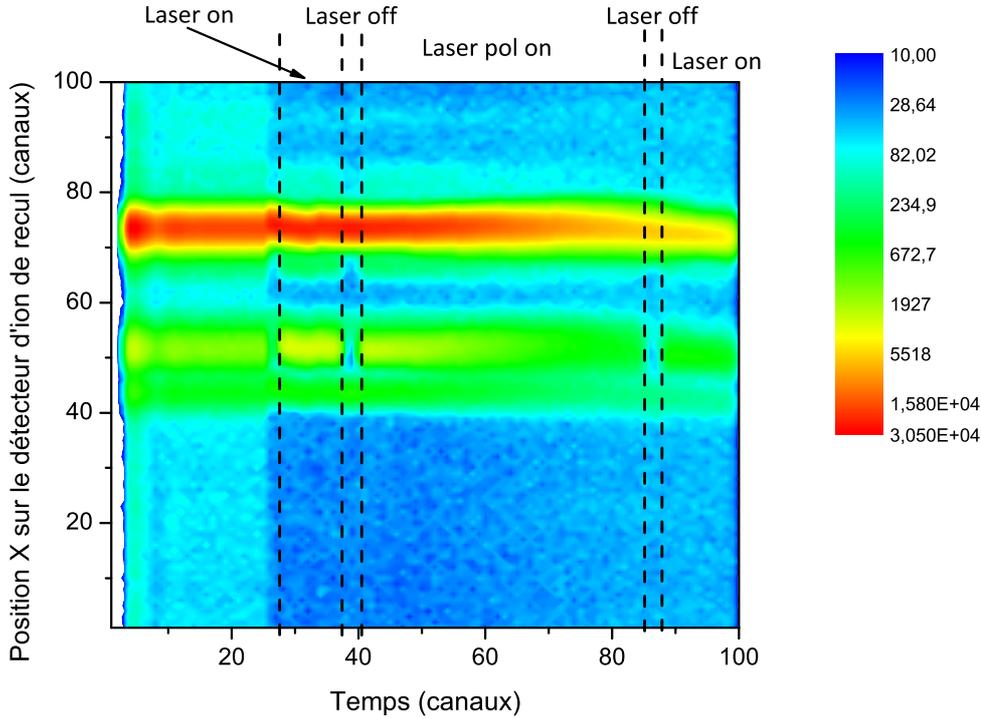


FIGURE 3.9: Distribution en X des ions de recul en fonction du temps dans le cycle du champ magnétique. La séquence après l'extinction du champ magnétique commence par une période où les lasers de piégeage sont allumés (laser on) puis une période sans lasers (laser off) où la cible est entièrement dans son état fondamental. Ensuite, vient une période de polarisation de 1.9 ms (laser pol on). Les lasers de piégeage sont de nouveaux envoyés dans la chambre de polarisation avant le rétablissement du champ magnétique.

où Y_0 correspond à une composante d'impulsion nulle selon l'axe Oy , déterminée par la symétrie de cette distribution. Ensuite, l'expression de l'impulsion selon l'axe Oz est donné par :

$$P_Z = a_{\perp}(TOF - TOF_0) \quad (3.7)$$

où TOF_0 correspond à une composante d'impulsion nulle selon l'axe Oz et où a_{\perp} est le coefficient qui permet de passer directement du temps de vol des ions à leurs impulsions selon cet axe. a_{\perp} s'écrit donc :

$$a_{\perp} = a_{//} \frac{\Delta TOF}{\Delta Y} \quad (3.8)$$

Le rapport $\frac{\Delta TOF}{\Delta Y}$ permet d'utiliser le coefficient $a_{//}$ pour la mesure de l'impulsion selon Oz à partir du temps de vol exprimé en canaux. Ce coefficient est calculé en prenant les largeurs à mi-hauteur d'une distribution en temps de vol sur la largeur à mi-hauteur de la même distribution en Y. Ceci est possible de par la symétrie cylindrique des distributions en angle de diffusion pour des collisions sur une cible non-orientée. De façon à être le plus précis possible, la voie

$\text{Rb}(5s) \rightarrow \text{Na}(3p)$ est choisie pour cet étalonnage car la statistique y est suffisante pour avoir une incertitude faible sur a_{\perp} .

Enfin il vient :

$$P_{\perp} = \sqrt{P_Y^2 + P_Z^2} \quad (3.9)$$

Dans les equations 3.6 et 3.7 on voit apparaître deux paramètres, Y_0 et TOF_0 . La détermination de ces deux paramètres est faite de manière différente qu'il s'agisse d'une cible où la symétrie cylindrique des angles de diffusion est respectée ou non.

Cas des angles de diffusion à symétrie cylindrique. Lors des premières expériences de collision, la projection sur un axe du moment cinétique total de la cible n'est pas fixé, ce qui a pour conséquence d'engendrer des distributions angulaires dont la symétrie cylindrique autour de l'axe du faisceau est restaurée par l'orientation aléatoire du moment cinétique. Dans cette configuration, il est assez aisé de trouver le centroïde des distributions en Y et en TOF afin de calculer les angles de diffusion.

Cas des angles de diffusion asymétriques. Lorsque le moment cinétique de la cible est aligné selon l'axe Y , l'apparition d'asymétrie sur les distributions en angle de diffusion du projectile rend la détermination du paramètre TOF_0 impossible par la méthode précédente. L'orientation du vecteur du moment cinétique selon l'axe Y peut être représenté par la rotation de l'orbitale $5p$ de l'électron actif dans le plan transverse à cette direction. Cette représentation classique du moment cinétique indique que le projectile et l'électron auront des vitesses relatives différentes selon que le projectile passe à droite ou à gauche de la cible. La conséquence de cette orientation de la cible se traduit par une modification des amplitudes de probabilités de capture électronique lorsque le projectile passe à gauche ou à droite de la cible (figure 3.10). L'asymétrie sera observable le long de l'axe (Oz) perpendiculaire à l'axe sur lequel est aligné le moment cinétique.

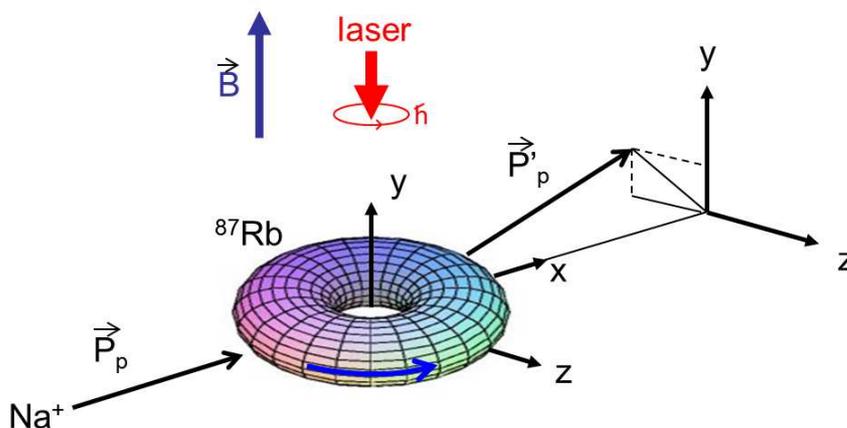


FIGURE 3.10: Représentation schématique de l'effet d'asymétrie droite-gauche lorsque le projectile collisionne avec une cible orientée.

Cette fois, TOF_0 est déterminé à l'aide des prédictions théoriques, en comparant les spectres expérimentaux à ceux donnés par les calculs. En revanche les distributions doivent rester symétriques en Y , ce qui permet de déterminer Y_0 à partir des données expérimentales.

6 Calcul des sections efficaces relatives et des distributions en angle de diffusion

6.1 Sections efficaces relatives

Maintenant que nous avons les distributions en Q de réaction pour chaque état de la cible, il faut déterminer l'aire des pics. Les sections efficaces relatives sont données par :

$$\sigma_{s,rel}^i = \frac{A_s^i}{\sum_i A_s^i} \quad (3.10)$$

où A_s^i est l'aire des pics correspondant à de la capture à partir du Rb(5s). De même pour la capture à partir du Rb(5p), on a :

$$\sigma_{p,rel}^i = \frac{A_p^i}{\sum_i A_p^i} \quad (3.11)$$

Les distributions en Q de réaction à partir des différents états de la cible sur lesquelles on intègre l'aire des pics sont présentées à titre d'exemple sur la figure 3.11. Pour le calcul d'erreur, on tiendra compte de l'erreur statistique et de celle liée aux déconvolutions lorsque celles-ci sont nécessaires.

6.2 Rapport des sections efficaces sur cible excitée ou dans l'état fondamental

Ces rapports de sections efficaces sont déterminés selon la méthode présentée au paragraphe 4.1.

6.3 Distributions en angle de diffusion

Pour obtenir les distributions en angle de diffusion du projectile, on sélectionne chacune des voies sur le spectre en Q de réaction. Lorsque des voies se recouvrent, on ne sélectionne que les événements où il n'y a pas de recouvrement. Ceci a pour conséquence de réduire la statistique pour les voies qui ne sont pas entièrement résolues. Lorsqu'un groupe de transitions est impossible à résoudre en Q de réaction, nous avons reconstruit les distributions en angle de diffusion pour l'ensemble du groupe de transition. L'angle de diffusion θ est donné par :

$$\theta = -\frac{P_{R,\perp}}{m_P v_P} \quad (3.12)$$

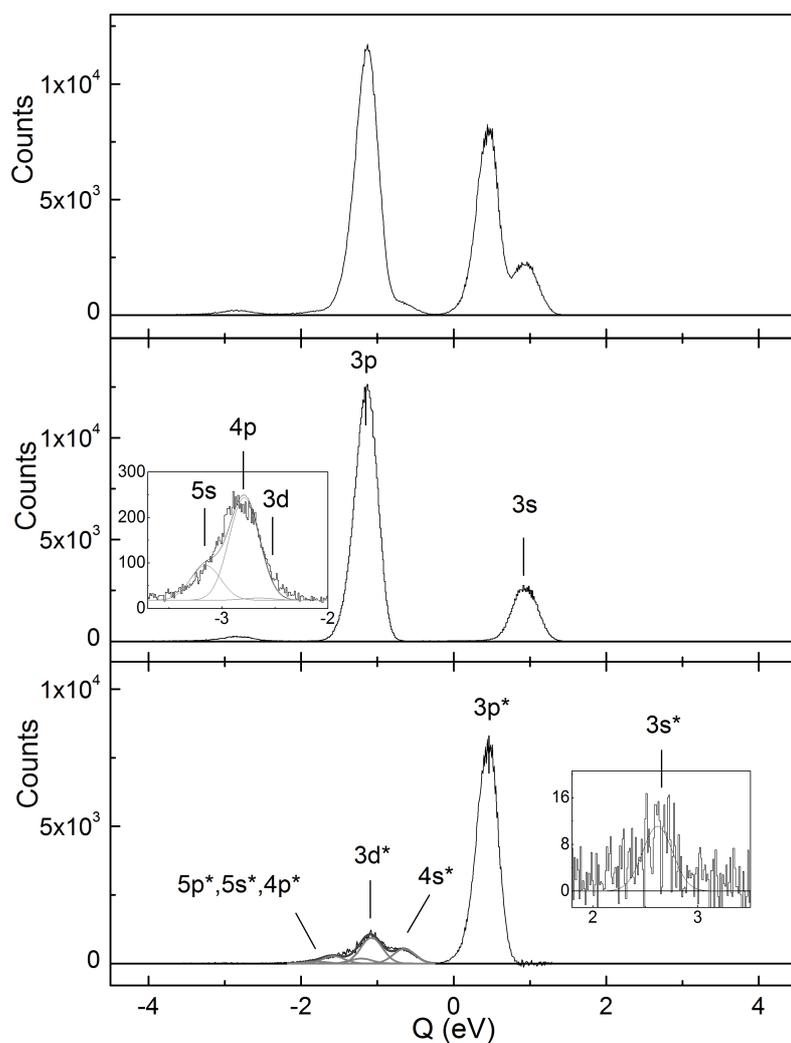


FIGURE 3.11: Distributions en Q de réaction pour des collisions $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s,5p)$ (haut), $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s)$ (milieu) et $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p)$ (bas) à 5 keV. L'état peuplé sur la cible est indiqué sur la figure. L'astérisque indique que la capture s'est faite à partir du $\text{Rb}(5p)$.

Chapitre 4

Résultats théoriques et expérimentaux

Les expériences menées lors de ce travail de thèse, avec le dispositif LPC-MOT décrit précédemment, visent à étudier la capture électronique lors de collisions ion-atome à basse énergie. Le système étudié est $\text{Na}^+ + {}^{87}\text{Rb}$ pour des énergies cinétiques de l'ordre du keV. Le dispositif expérimental utilisé donne accès aux sections efficaces relatives d'un grand nombre de voies de capture, même très faiblement peuplées, car le rapport *signal/bruit* est très favorable. Comme son nom l'indique, la méthode employée vise à déterminer l'impulsion de l'ion de recul qui fournit l'information nécessaire à la reconstruction des Q de réaction ainsi que des angles de diffusion du projectile. La très bonne résolution en position des ions de recul sur le détecteur permet une haute résolution sur la composante parallèle au faisceau projectile de l'impulsion de l'ion de recul. La composante transverse de l'impulsion de l'ion de recul est quant à elle liée à l'angle de diffusion du projectile. Les caractéristiques du dispositif utilisé ont permis de mettre en évidence des structures très fines qui n'ont jamais pu être observées auparavant. Comme il a été souligné dans la partie descriptive de ce dispositif expérimental, l'un des avantages du MOT est sa capacité à produire facilement des cibles préparées à l'aide de lasers. Dans un premier temps, la capture électronique est étudiée pour des collisions avec une cible de rubidium dans son état fondamental ($5^2S_{1/2}$) ou dans l'un des premiers états excités ($5^2P_{3/2}$). Dans les expériences suivantes, après modification du dispositif, la cible est préparée dans des états orientés où la projection m_F de son moment cinétique total est maximale en valeur absolue et où l'orientation du vecteur correspondant est aligné selon un axe perpendiculaire à l'axe du faisceau projectile incident. Dans cette partie, les résultats expérimentaux de ces expériences seront présentés et comparés aux calculs théoriques qui ont été détaillés dans le premier chapitre de ce manuscrit.

1 Étude de la capture électronique sur cibles non polarisées

Pour commencer, il peut être utile de rappeler les principaux niveaux accessibles à l'électron actif du système $\text{NaRb}^+ + e^-$, figure 4.1, ainsi que le diagramme de corrélation relatif à la molécule ionique NaRb^+ , figure 4.2. Aux énergies considérées dans cette étude, l'électron actif ira peupler préférentiellement les états de n et de l faible sur le sodium. Les principaux états de capture seront donc les états $3s$, $3p$, $4s$, $3d$ et $4p$. Le diagramme de corrélation permet d'identifier les pseudo-croisements entre les différentes courbes d'énergie potentielle et de déterminer les distances internucléaires auxquelles les transitions seront les plus probables.

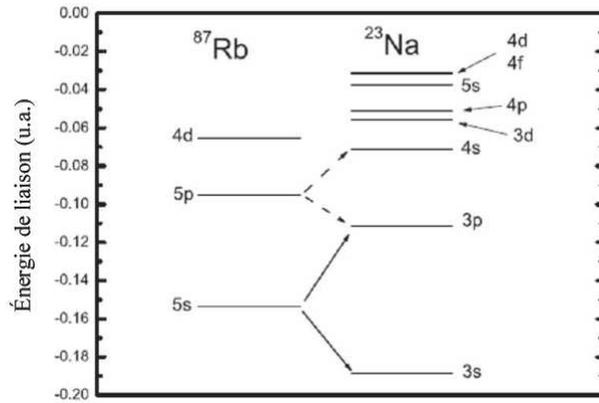


FIGURE 4.1: Schéma des principaux niveaux électroniques accessibles pour le sodium et le rubidium lors de la collision.

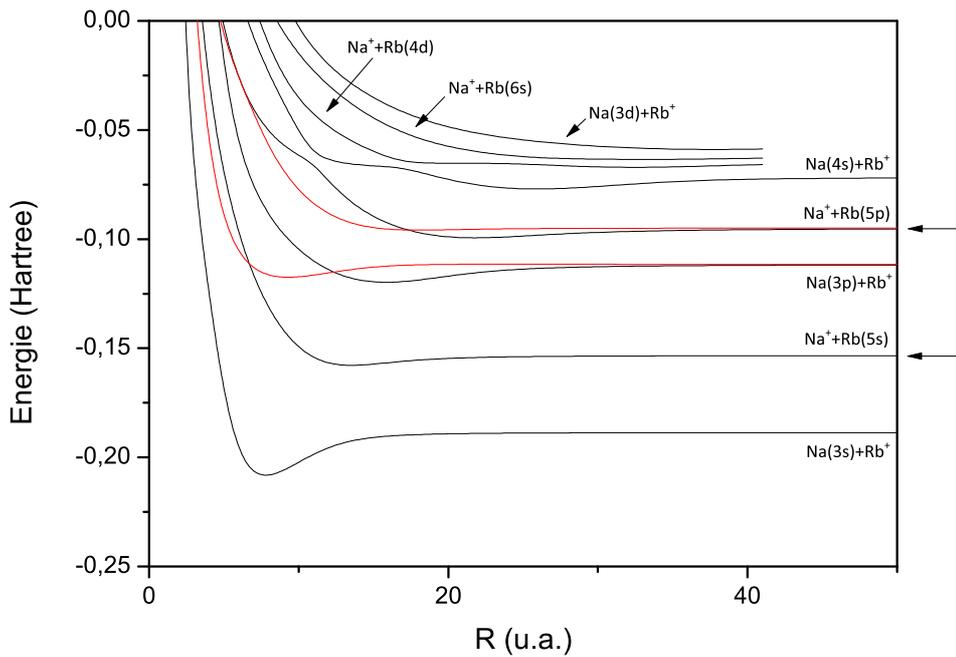


FIGURE 4.2: Diagramme de corrélation de la molécule ionique NaRb^+ . Les courbes d'énergie potentielle des états σ sont représentés en noir et ceux des états π en rouge.

1.1 Sections efficaces relatives

Nous avons tout d'abord enregistré les distributions en Q de réaction des différents canaux accessibles expérimentalement. Les spectres correspondants sont donnés dans les figures 4.3, 4.4 et 4.5 pour chacune des trois énergies de collision 0.5 keV, 2 keV et 5 keV. Le spectre situé dans le haut de chaque figure concerne les mesures faites *laser on*, c'est-à-dire sur des cibles

dans l'état fondamental Rb(5s) et dans l'état excité Rb(5p). Le spectre donné en milieu de figure concerne les mesures *laser off*, lorsque toutes les cibles sont dans l'état fondamental Rb(5s). Dans le bas de chaque figure est présenté le spectre en Q de réaction concernant la cible dans l'état excité Rb(5p) uniquement. Ce dernier spectre est obtenu en soustrayant du spectre *laser on* une fraction α du spectre *laser off* de façon à faire disparaître les contributions correspondantes à la capture depuis l'état fondamental Rb(5s). Le paramètre α est directement lié à la fraction excitée f du nuage d'atomes (voir chapitre 3). La fraction excitée dépend des conditions de fonctionnement du piège, c'est pourquoi elle pourra être différente d'une expérience à une autre. Dans le cas des collisions $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s,5p)$ à 0.5 keV, un seul pic est exploitable, celui associé à la capture depuis le rubidium à l'état fondamental Rb(5s) vers l'état excité 3p du sodium Na(3p) (voir figure 4.3(haut)). Malheureusement, ce pic est mélangé à une contribution venant de la capture $\text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(3d,4p)$. Nous avons toutefois négligé cette contribution minoritaire et avons trouvé une valeur de 0.24 ± 0.03 pour la fraction excitée. Pour ce qui concerne les expériences réalisées à 2 et 5 keV, la fraction excitée est obtenue avec précision en utilisant le pic correspondant à la voie $\text{Rb}(5s) \rightarrow \text{Na}(3s)$. Nous avons trouvé : $f = 0.260 \pm 0.003$ à 2 keV et $f = 0.153 \pm 0.004$ à 5 keV. Les sections efficaces relatives sont obtenues en intégrant les pics associés aux configurations nl peuplées sur le projectile. Lorsque la résolution en Q de réaction ne permet pas de séparer correctement les pics, le spectre est *fité* à une combinaison de gaussiennes de position et de largeur déterminées. Les incertitudes sur les sections efficaces sont purement statistiques. Elles tiennent compte de l'erreur due à la procédure de soustraction du spectre *laser off* ainsi qu'à l'erreur associée à l'ajustement des gaussiennes. Pour des énergies de collision de 0.5, 2 et 5 keV, les résolutions (rms) obtenues sont respectivement : $\Delta Q = 43, 87$ et 137 meV.

Dans la présentation des résultats obtenus pour les sections efficaces relatives qui va suivre (tableaux 4.1 et 4.2), les sections efficaces relatives sont normalisées à la section efficace totale ; de plus, les données expérimentales issues de l'expérience LPC-MOT seront confrontées aux calculs MOCC ainsi qu'aux résultats issus de l'expérience réalisée à KSU [66].

La première chose que l'on peut voir dans ces tableaux est le bon accord entre les sections efficaces théoriques et expérimentales. On peut également voir que les incertitudes associées aux résultats du présent travail sont considérablement plus faibles que celles données par les autres auteurs. Ceci provient du fait que nous utilisons ici une extraction transverse des ions de recul et que nous commutons le champ magnétique du piège durant la prise de données. En conséquence, le bruit de fond est considérablement réduit et autorise la détection des voies de capture faiblement peuplées.

1.1.1 $\text{Na}^+ + {}^{87}\text{Rb}(5s)$

On remarque ici que le canal de capture principal conduit à la capture d'un électron dans l'état 3p du Na quelque soit l'énergie de collision. A 0.5 keV, ce canal est d'ailleurs exclusif, aucune autre voie n'a pu être mise en évidence expérimentalement et les calculs théoriques fournissent un résultat très similaire. Les résultats à 2 et 5 keV montrent que d'autres voies sont accessibles, bien que moins peuplées que celle menant à l'état 3p du Na. Par exemple, la voie qui mène au Na(3s) prend plus d'importance quand l'énergie augmente jusqu'à représenter 18.73% de la section efficace totale à 5 keV. Un tel comportement peut être compris par l'observation du diagramme de corrélation (figure 4.2). Les pseudo-croisements entre la voie d'entrée $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s)$ et les deux voies σ se dissociant en $\text{Na}(3s) + \text{Rb}^+$ et $\text{Na}(3p) + \text{Rb}^+$ sont

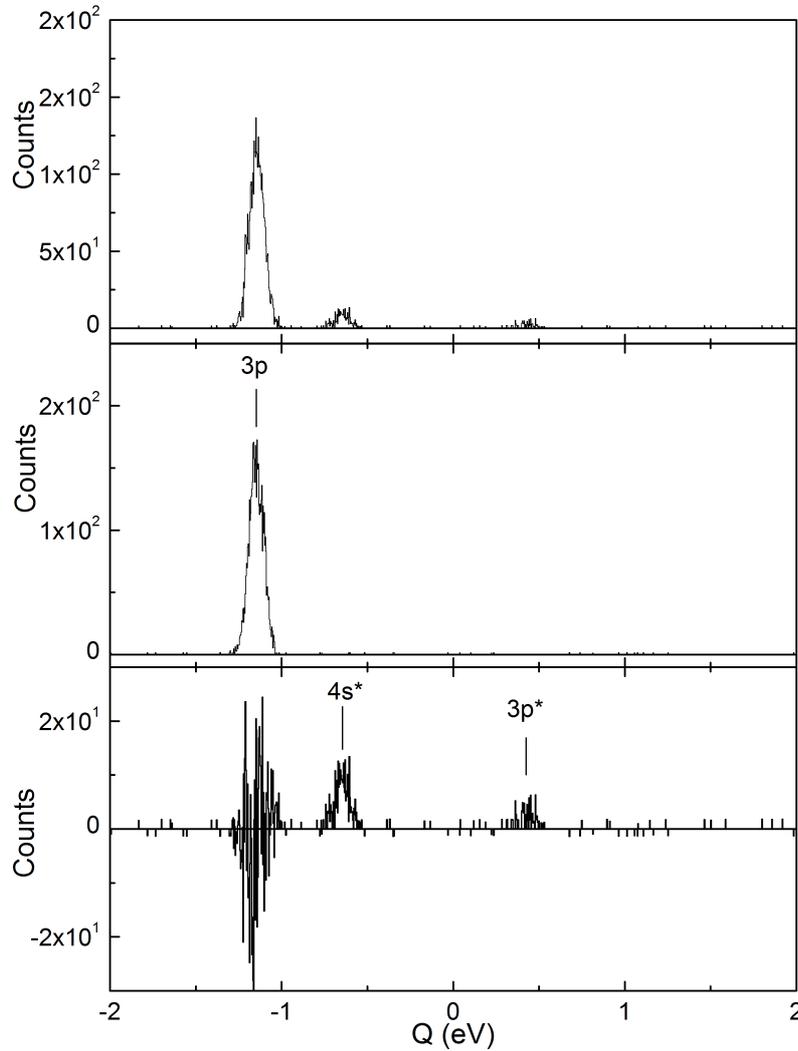


FIGURE 4.3: Distributions en Q de réaction des évènements pour des collisions Na^+ sur $\text{Rb}(5s,5p)$ (haut), $\text{Rb}(5s)$ (milieu), $\text{Rb}(5p)$ (bas) à une énergie de 0.5 keV.

trop grands pour permettre une transition radiale non-adiabatique efficace aux faibles vitesses de collision. Par contre, on conçoit bien que lorsque la vitesse de collision augmente le couplage radial augmente permettant ainsi l'accroissement du peuplement de l'état $\text{Na}(3s)$. Pour ce qui concerne l'état $\text{Na}(3p)$, la capture se fait principalement par transitions rotationnelles autour de $R \sim 6$ u.a. où la voie d'entrée croise l'état $\text{Na}(3p\pi)+\text{Rb}^+$ [69]. Cependant, lorsque la vitesse augmente, l'accroissement du peuplement de l'état $\text{Na}(3p\sigma)$ par transition radiale devient également possible comme nous venons de le voir pour l'état $\text{Na}(3s)$. Les transitions vers les

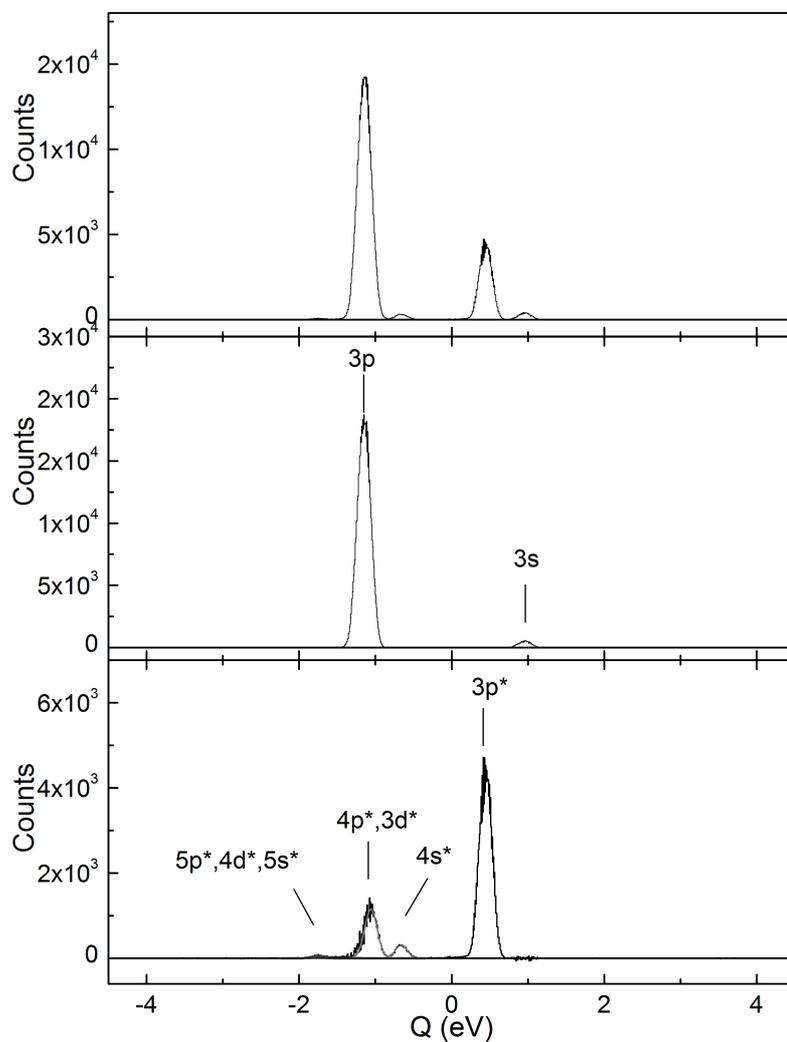


FIGURE 4.4: Distributions en Q de réaction des évènements pour des collisions Na^+ sur $\text{Rb}(5s,5p)$ (haut), $\text{Rb}(5s)$ (milieu), $\text{Rb}(5p)$ (bas) à une énergie de 2 keV.

niveaux plus excités, $\text{Na}(3d,4s,(n \geq 4, l \geq 2))$ apparaissent également mais leurs contributions à la section efficace totale ne dépassent pas quelques pour cent.

1.1.2 $\text{Na}^+ + {}^{87}\text{Rb}(5p)$

A l'image de la section précédente, les résultats sont regroupés dans le tableau 4.2.

Dans le tableau, on voit que l'état $\text{Na}(3s)$ est peuplé seulement pour une énergie de 5 keV,

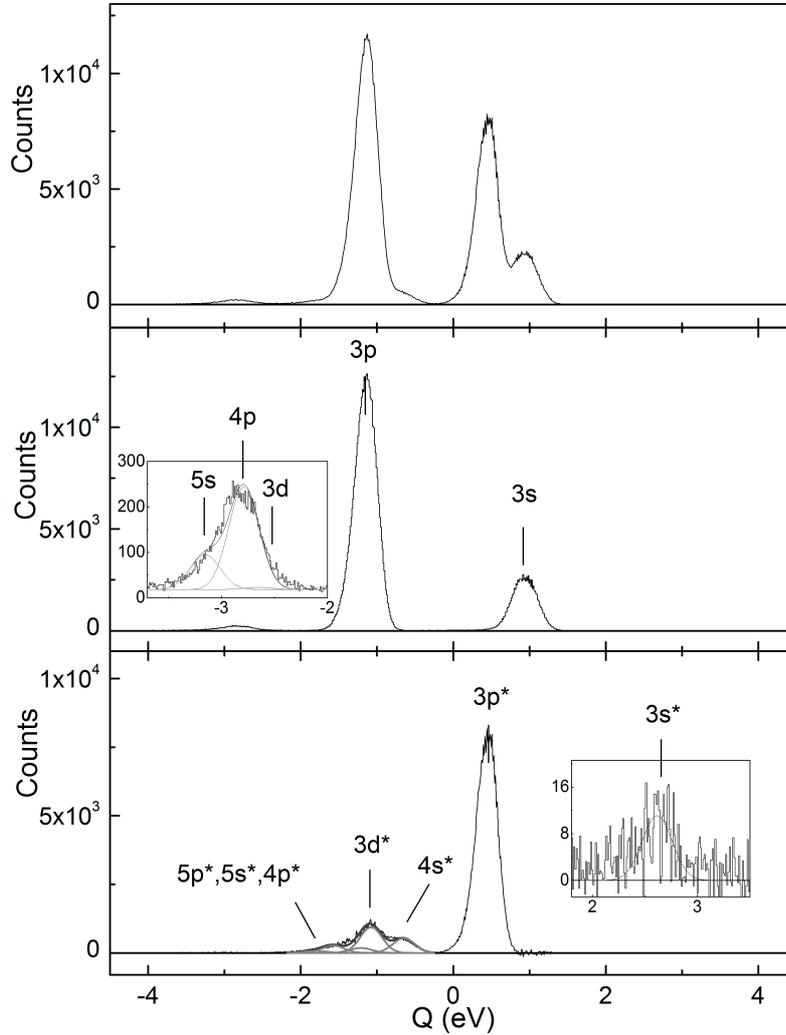


FIGURE 4.5: Distributions en Q de réaction des évènements pour des collisions Na^+ sur $\text{Rb}(5s,5p)$ (haut), $\text{Rb}(5s)$ (milieu), $\text{Rb}(5p)$ (bas) à une énergie de 5 keV.

dans une très faible proportion. Ceci n'a rien de surprenant car le pseudo-croisement qui permet d'aller vers cet état est très large et donc moins efficace lorsque la vitesse du projectile est faible.

On constate que l'état $\text{Na}(3p)$ est dominant et que la section efficace associée augmente avec l'énergie de collision. Cet état peut être peuplé directement via le couplage radial. En effet, sur le diagramme de corrélation, on peut vérifier que pour chacune des deux symétries σ et π , les deux courbes de potentiel associées à la voie d'entrée $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p)$ et à la voie de sortie $\text{Na}(3p) + \text{Rb}^+$ montrent un pseudo-croisement diffus au voisinage de 17 u.a. et 14 u.a.

Énergie (keV)	Etat final	MOTRIMS [69]	MOTRIMS [72]	KSU [66]	MOCC
0.5	3p	1.0000 ± 0.0150	-	-	0.9998
2	3s	0.0264 ± 0.0003	0.029 ± 0.001	0.02 ± 0.01	0.0296
	3p	0.9722 ± 0.0030	0.970 ± 0.004	0.98 ± 0.05	0.9703
	3d+4p+5s	0.0014 ± 0.0001	0.0012 ± 0.0007	0.00 ± 0.02	0.0001
5	3s	0.1873 ± 0.0022	0.191 ± 0.011	0.19 ± 0.07	0.1927
	3p	0.7915 ± 0.0084	0.802 ± 0.074	0.79 ± 0.29	0.8051
	4s	0.0007 ± 0.0001	-	-	0.0004
	3d+4p+5s	0.0205 ± 0.0003	0.0078 ± 0.0023	0.02 ± 0.01	0.0017

TABLE 4.1: Récapitulatif des résultats obtenus pour les sections efficaces relatives lors de la collision $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s)$ à 0.5, 2 et 5 keV. Les résultats obtenus lors de ce travail de thèse [69] sont comparés aux résultats précédemment obtenues [72] ainsi qu'aux résultats théoriques. Les sections efficaces relatives expérimentales sont normalisées à la section efficace totale mesurée.

Énergie (keV)	Etat final	MOTRIMS [69]	MOTRIMS [72]	KSU [66]	MOCC
0.5	3p	0.2506 ± 0.0498	-	-	0.0561
	4s	0.7494 ± 0.1001	-	-	0.7702
2	3p	0.7440 ± 0.0052	0.631 ± 0.117	0.60 ± 0.14	0.7766
	4s	0.0494 ± 0.0007	0.027 ± 0.007	0.08 ± 0.03	0.0431
	3d+4p	0.1943 ± 0.0019	0.338 ± 0.245	0.30 ± 0.16	0.1737
	4d	0.0123 ± 0.0003	0.0042 ± 0.0026	0.02 ± 0.01	0.0024
5	3s	0.0015 ± 0.0001	0.0017 ± 0.0005	-	0.0007
	3p	0.7959 ± 0.0136	0.868 ± 0.015	0.82 ± 0.05	0.8184
	3d	0.0997 ± 0.0037	-	-	0.0985
	4s	0.0525 ± 0.0029	0.053 ± 0.004	0.08 ± 0.01	0.0595
	4p+5s	0.0326 ± 0.0026	-	-	0.0130
	4d	0.0178 ± 0.0023	0.084 ± 0.023	0.03 ± 0.01	0.0071

TABLE 4.2: Récapitulatif des résultats obtenus pour les sections efficaces relatives lors de la collision $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p)$ à 0.5, 2 et 5 keV. Les résultats obtenus lors de ce travail thèse [69] sont comparés aux résultats précédemment obtenues [72] ainsi qu'aux résultats théoriques. Les sections efficaces relatives expérimentales sont normalisées à la section efficace totale mesurée.

respectivement. Le gap séparant les deux états au croisement évité est suffisamment grand pour défavoriser la population de $\text{Na}(3p)$ aux faibles énergies de collision.

Sur le diagramme de corrélation on peut voir un pseudo-croisement très prononcé au voisinage du 10 u.a. entre les états de symétrie σ correspondants à la voie d'entrée $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p)$ et à la voie de sortie $\text{Na}(4s) + \text{Rb}^+$. Il est responsable du peuplement direct de l'état $\text{Na}(4s)$ qui domine à 0.5 keV (voir figure 4.3).

La faible statistique acquise à 0.5 keV conduit à un spectre en Q de réaction pour lequel il est difficile d'extraire les sections efficaces relatives des voies de capture menant aux états $\text{Na}(3d, 4p)$. Expérimentalement, la mesure des sections efficaces relatives peut donc être erronée, ce qui mène à une section efficace relative surestimée pour la transition vers le $\text{Na}(3p)$ par rapport à ce que prédit le calcul MOCC. Lorsque l'énergie augmente, la statistique est meilleure

et l'accord théorie-expérience devient bon. La transition vers l'état 3p du sodium devient dominante et les contributions non négligeables des sections efficaces relatives des transitions vers les états Na(3d,4p) à la section efficace totale sont mises en évidence expérimentalement.

L'ensemble de ces résultats montre un accord très satisfaisant entre l'expérience MOTRIMS et les calculs MOCC, bien que pour la capture vers les états les plus excités du Na, les calculs sous-estiment leur contribution à la capture totale. Ceci est dû à l'introduction de la fonction de coupure $F_{cut}(b)$ qui interdit les transitions inélastiques ayant lieu aux petits paramètres d'impacts et qui peuplent ces états plus excités. Néanmoins, les écarts relatifs observés ne dépassent pas 3% de la capture totale.

1.1.3 Rapport des sections efficaces totales

La technique MOTRIMS possède l'avantage de donner accès à la fraction excitée du nuage d'atomes froids. Cette mesure nous permet alors de déterminer le rapport des sections efficaces absolues σ_p/σ_s comme nous l'avons décrit dans le chapitre 2.

A 0.5, 2 et 5 keV, les rapports de ces sections efficaces absolues sont respectivement de 0.324 ± 0.041 , 1.15 ± 0.01 et 3.95 ± 0.010 . Les expériences de Blicek [72] et de Lee [47] donnent des résultats assez similaires, respectivement de 1.47 ± 0.58 et 1.60 ± 0.80 à 2keV et de 4.15 ± 0.75 et 3.70 ± 0.31 à 5 keV.

Nous noterons que les résultats des calculs TCAOCC de Lee n'ont pas été présentés jusqu'ici car l'accord général avec les résultats expérimentaux est moins bon. Néanmoins, bien que nous n'avons pas mesuré les sections efficaces absolues il peut être intéressant de confronter les résultats des deux méthodes théoriques. Pour les collisions $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s)$, les calculs MOCC et TCAOCC sont en accord. En revanche, pour les collisions $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p)$ les deux calculs sont en désaccord. On trouve pour ces dernières, des sections efficaces pour les transitions vers les états Na(3p) et Na(4s) respectivement de 94, 20 et 10, 39.10^{-16} cm² avec le calcul TCAOCC et 18, 51 et 1, 03.10^{-16} cm² avec le calcul MOCC. Afin de trancher, nous pouvons utiliser les valeurs des rapports de sections efficaces absolues. C'est le calcul MOCC qui est en accord avec les valeurs expérimentales car il prédit une valeur de 1.31 à 2 keV, proche de la valeur expérimentale de 1.15, contre une valeur supérieure à 6.46 pour le calcul TCAOCC. A 5 keV, la valeur expérimentale de 3.95 est en bien meilleur accord avec le calcul MOCC, qui donne 3.56, qu'avec le calcul TCAOCC qui lui, donne une valeur supérieure à 6.09.

1.2 Dynamique de la collision

Les calculs semi-classiques MOCC, faisant intervenir la notion de paramètre d'impact, sont un cadre théorique idéal pour comprendre la dynamique de la collision ainsi que les sections efficaces relatives au delà de l'analyse du diagramme de corrélation (figure 4.2).

Cette fois, l'outil le plus pertinent pour analyser les résultats sont les $bP(b)$ correspondant à chaque transition. Les distributions de probabilités sont données figure 4.6.

Nous avons représenté les distributions $bP(b)$ pour des collisions $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s, 5p)$ à 5 keV. Des expériences que nous avons réalisé, c'est à cette énergie que l'on observe le plus grand nombre de voies de sorties. La figure 4.6(a) correspond au cas $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s)$ qui mène principalement à la capture dans l'état Na(3p π) autour de $b = 6$ u.a. (couplage rotationnel au croisement), puis dans une moindre mesure, vers l'état Na(3s) qui présente une structure oscillante en $bP(b)$ (couplage radial faible le long de la trajectoire). Sur les figures 4.6(b) et 4.6(c),

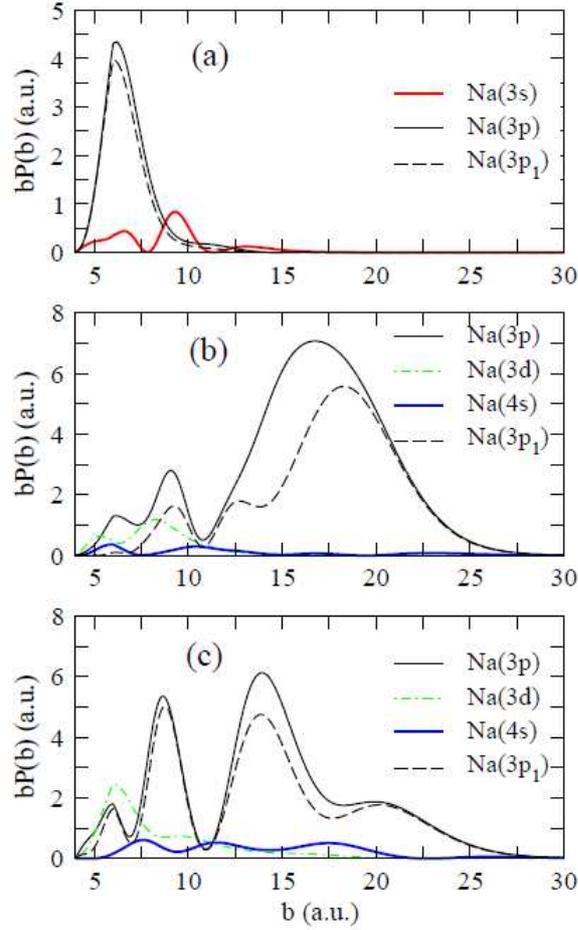


FIGURE 4.6: Probabilités pondérées $bP(b)$ en fonction du paramètre d'impact de la collision pour les principaux canaux de capture. (a) $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s)$, (b) $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p\sigma)$ et (c) $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p\pi)$ pour une énergie de projectile de 5 keV.

qui représentent les probabilités pondérées pour des collisions $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p\pi)$ et $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p\sigma)$, on observe également des oscillations. Ces oscillations sont dues à la dépendance en b , à vitesse fixée, de la phase $e^{-i \int_0^t (E_m(t') - E_k(t')) dt'}$ qui est accumulée le long de la trajectoire des deux noyaux et qui est présente dans les équations couplées (voir chapitre 1). Dans le cas d'une transition entre deux états à un pseudo-croisement unique et bien localisé, la structure de ces oscillations est simple. Elles sont alors connues sous le nom d'oscillations de Stueckelberg [42, 73]. Dans le cas le plus général, lorsqu'une transition implique plusieurs états intermédiaires, mélangeant plusieurs phases, des phénomènes d'interférences entre divers chemins de transition peuvent apparaître [74, 75]. Les interférences en mécanique quantique peuvent être illustrées par l'image classique suivante où les oscillations de la probabilité sont liées au nombre de sauts que fait l'électron entre la cible et le projectile au cours de la collision ; avec la contrainte imposant que le nombre de sauts diminue lorsque le paramètre d'impact augmente.

Le chemin emprunté par les électrons pour transiter d'un état initial vers un état final peut être facilement compris si on considère l'évolution temporelle des probabilités au cours de la collision pour des paramètres d'impacts représentatifs. La figure 4.7 représente cette évolution

temporelle des probabilités pour la collision $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s)$ pour $b = 9$ u.a.

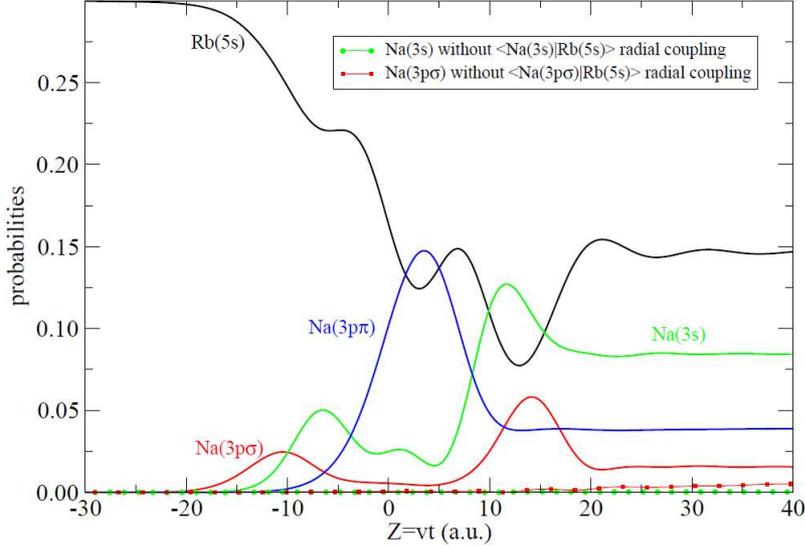


FIGURE 4.7: Évolution temporelle des probabilités associées aux transitions $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s)$ vers $\text{Na}(3s, 3p\pi, 3p\sigma) + \text{Rb}^+$ pour des collisions $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5\sigma)$ à 5 keV et pour un paramètre d'impact $b = 9$ u.a.

Dans la partie $Z < 0$ u.a., les états $\text{Na}(3s)$ et $\text{Na}(3p\sigma)$ sont directement peuplés via des transitions radiales entre $Z = -14$ et $Z = -8$ u.a., ce qui correspond à des distances internucléaires d'environ 16 et 12 u.a. et donc aux pseudo-croisements larges de ces états avec la voie d'entrée $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s)$ (voir figure 4.2). Lorsque les centres continuent à se rapprocher, le niveau $\text{Na}(3p\pi)$ commence à se peupler par des transitions rotationnelles pour des distances internucléaires faibles, $Z \sim 0$ u.a. soit $R \simeq b = 9$ u.a. Lorsque la distance internucléaire croît de nouveau, les transitions se font de façon symétrique à la phase d'approche. On voit clairement que les trois états de capture $\text{Na}(3s, 3p\pi, 3p\sigma)$ sont directement peuplés par la voie d'entrée. On peut le vérifier à l'aide des calculs MOCC dans lesquels on peut supprimer artificiellement les couplages qui induisent les transitions. On montre alors que les deux états de capture $\text{Na}(3s)$ et $\text{Na}(3p\sigma)$ sont absents de la voie de sortie lorsqu'on annule respectivement les deux éléments de couplage radial $\langle \text{Na}(3s) | \partial/\partial R | \text{Rb}(5s) \rangle$ et $\langle \text{Na}(3p\sigma) | \partial/\partial R | \text{Rb}(5s) \rangle$, tandis que c'est l'état de capture $\text{Na}(3p\pi)$ qui disparaît lorsqu'on annule le couplage rotationnel $\langle \text{Na}(3p\pi) | iL_y | \text{Rb}(5s) \rangle$. On le voit sur la figure 4.7, les probabilités de transitions vers les états concernés deviennent quasi-nulles et sont quasiment confondues avec l'axe des abscisses.

On peut procéder de la même manière pour étudier les transitions issues des états $\text{Rb}(5p\pi, 5p\sigma)$. Sur la figure 4.8, où le paramètre d'impact a été fixé à 17 u.a., on voit que dans la voie d'entrée, l'état incident $\text{Rb}(5p\sigma)$ se dépeuple au profit de l'état $\text{Rb}(5p\pi)$ sous l'action d'un fort couplage rotationnel. Après cette redistribution, les états $\text{Na}(3p\sigma)$ et $\text{Na}(3p\pi)$ se peuplent. Nous pouvons, ici aussi, annuler successivement les termes correspondant aux couplages rotationnels $\langle \text{Na}(3p\sigma) | iL_y | \text{Rb}(5p\pi) \rangle$ et $\langle \text{Na}(3p\pi) | iL_y | \text{Na}(3p\sigma) \rangle$, ce qui permet de montrer que le chemin privilégié est $\text{Rb}(5p\sigma) \rightarrow \text{Rb}(5p\pi) \rightarrow \text{Na}(3p\sigma) \rightarrow \text{Na}(3p\pi)$. On voit également que lorsque le couplage rotationnel $\langle \text{Na}(3p\pi) | iL_y | \text{Na}(3p\sigma) \rangle = 0$ la transition radiale $\text{Rb}(5p\pi) \rightarrow \text{Na}(3p\pi)$ est active pour $Z \geq -10$ u.a., ce qui correspond au pseudo-croisement autour de $R = 17$ u.a. sur la figure 4.2. De la même façon, lorsque le couplage rotation-

nel $\langle Na(3p\sigma | iL_y | Rb(5p\pi) \rangle = 0$, on observe d'une part la persistance d'une transition radiale $Rb(5p\sigma) \rightarrow Na(3p\sigma)$ qui commence à $Z = -20$ u.a., et d'autre part la redistribution rotationnelle du flux électronique de $Na(3p\sigma) \rightarrow Na(3p\pi)$ à longue distance inter-nucléaire dans la voie de sortie. Les états $Na(3p\sigma)$ et $Na(3p\pi)$ sont tous deux peuplés via différents chemins qui peuvent alors interférer et donner naissance à des oscillations telles que celles de Stueckelberg pour la fonction $bP(b)$.

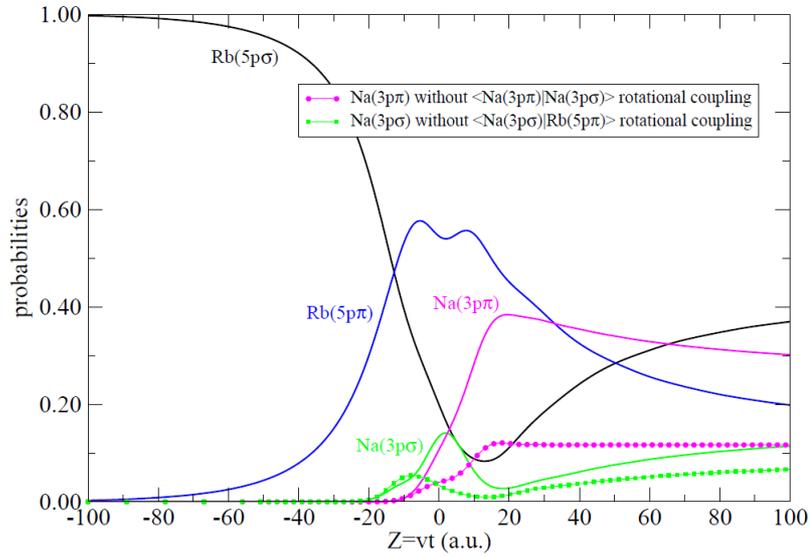


FIGURE 4.8: Évolution temporelle des probabilités associées aux transitions $Na^+ + Rb(5p\pi, 5p\sigma)$ vers $Na(3s, 3p\pi, 3p\sigma) + Rb^+$ pour des collisions $Na^+ + Rb(5\sigma)$ à 5 keV et pour un paramètre d'impact $b = 17$ u.a.

Finalement, pour la collision $Na^+ + Rb(5p\pi)$ (voir figure 4.9), après redistribution rotationnelle du flux électronique, $Rb(5p\pi) \rightarrow Rb(5p\sigma)$, les transitions sont essentiellement radiales. En annulant les couplages appropriés, on conclue que le chemin emprunté pour peupler l'état $Na(3p\sigma)$ est $Rb(5p\pi) \rightarrow Rb(5p\sigma) \rightarrow Na(3p\sigma)$ alors que l'état $Na(3p\pi)$ est peuplé principalement par des transitions directes à partir de la voie d'entrée.

Dans la voie de sortie de la collision, on observe qu'une petite partie du flux électronique est promue vers des états plus excités du Na. Ces transitions se font à partir de la transition $Rb(5p\sigma) \rightarrow Na(4s)$ puis par des transitions successives impliquant des pseudo-croisements entre niveaux moléculaires adjacents.

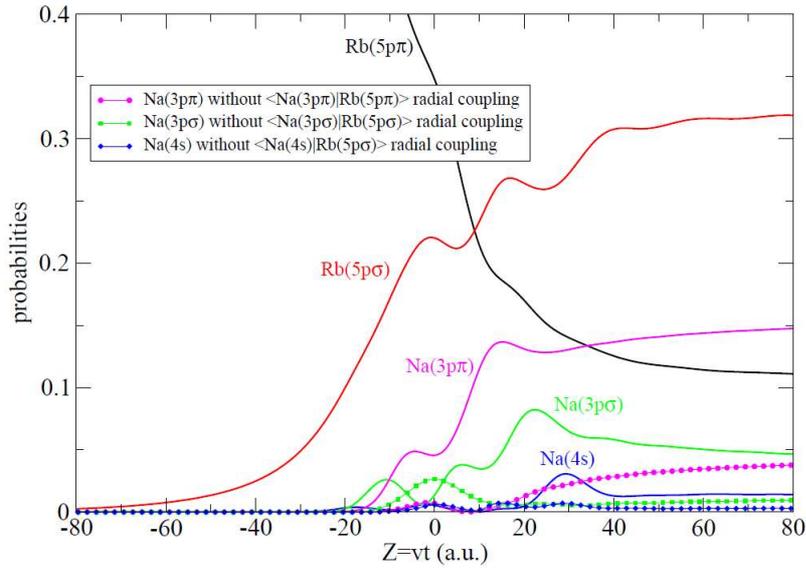


FIGURE 4.9: Évolution temporelle des probabilités associées aux transitions $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p\pi, 5p\sigma)$ vers $\text{Na}(3s, 3p\pi, 3p\sigma) + \text{Rb}^+$ pour des collisions $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5\sigma)$ à 5 keV et pour un paramètre d'impact $b = 13$ u.a.

1.3 Sections efficaces différentielles

Dans cette partie, les sections efficaces différentielles (DCS) en angle de diffusion vont être présentées pour les canaux dont la statistique le permet. Les DCSs sont très sensibles aux potentiels modèles utilisés dans le calcul théorique, la confrontation théorie/expérience permet donc de vérifier la validité de ces potentiels. Pour les systèmes $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s)$ puis $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p)$ nous présenterons tout d'abord de façon générale l'ensemble des résultats avant de discuter individuellement chacune des distributions. Sur chacun des spectres présentés, les intégrales des distributions théoriques ont préalablement été normalisées aux intégrales de celles issues des résultats expérimentaux.

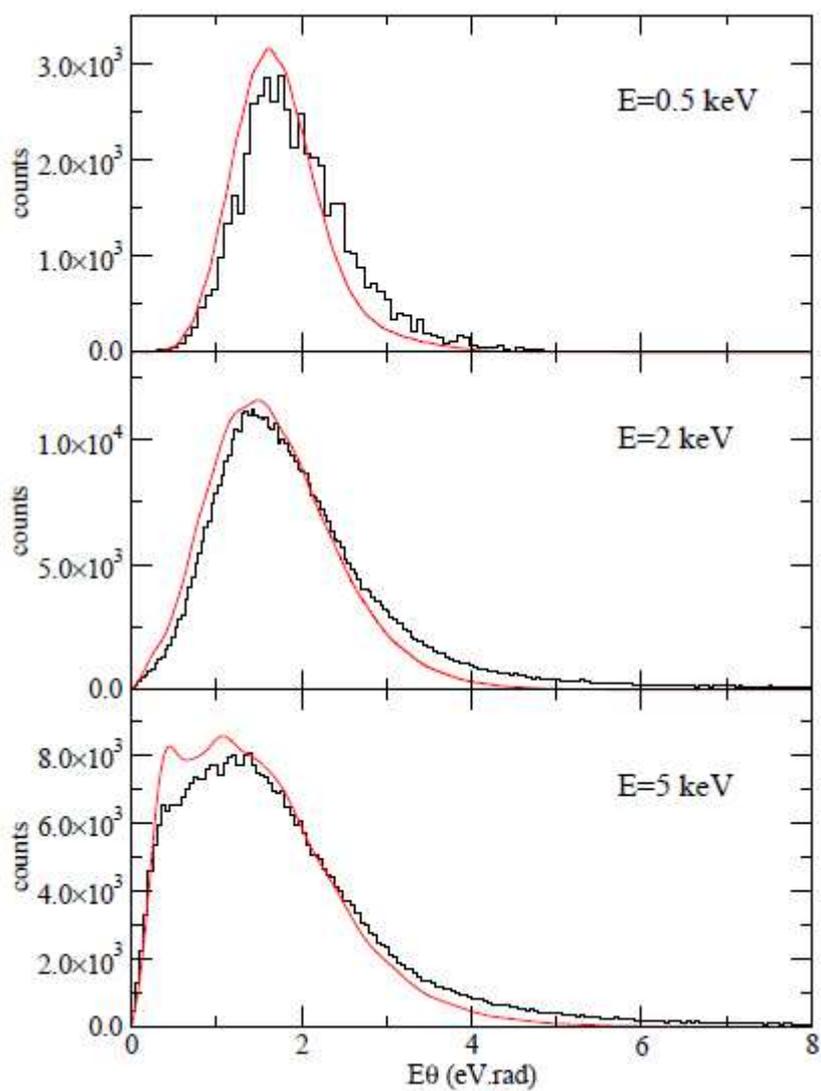
1.3.1 Système $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s)$ 

FIGURE 4.10: Distributions en angle de diffusion du projectile pour la voie $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s) \rightarrow \text{Na}(3p) + \text{Rb}$ à 0.5 keV, 2 keV et 5 keV.

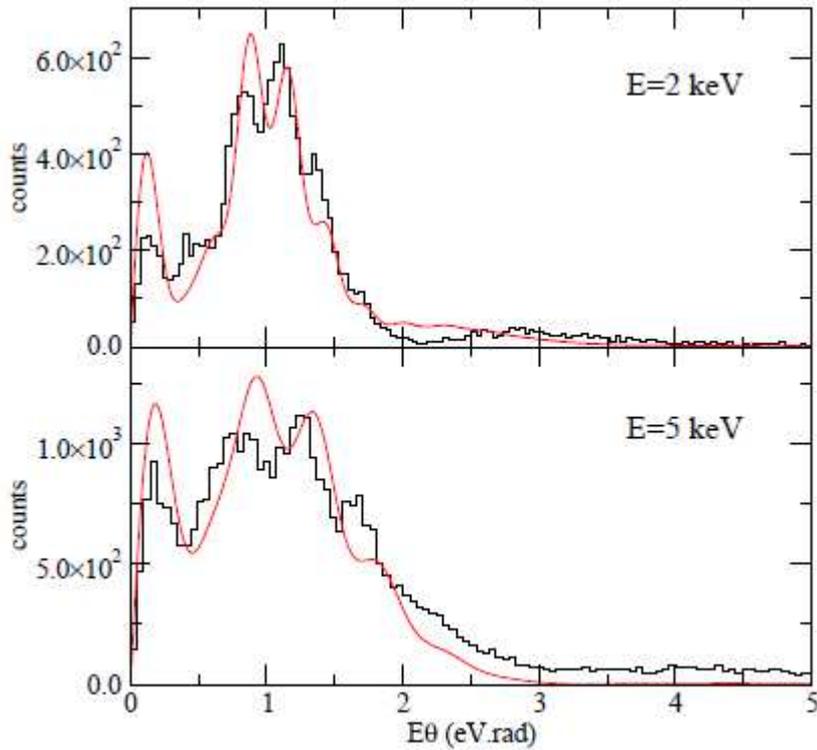


FIGURE 4.11: Distributions en angle de diffusion du projectile pour la voie $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s) \rightarrow \text{Na}(3s) + \text{Rb}^+$ à 2keV et 5 keV.

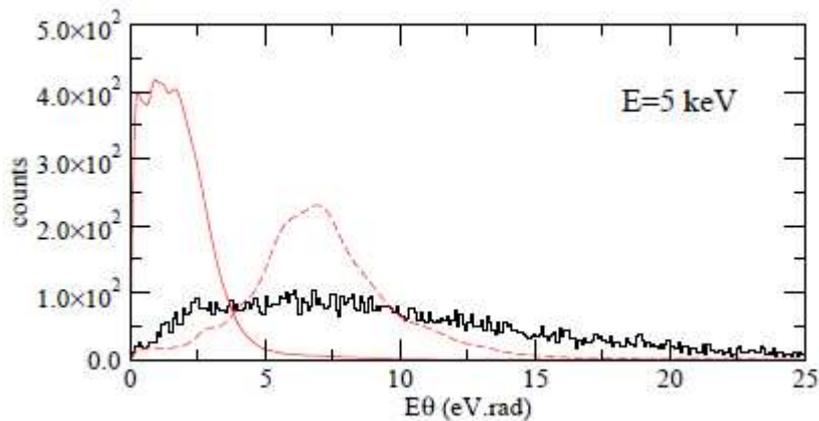


FIGURE 4.12: Distributions en angle de diffusion du projectile pour la voie $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s) \rightarrow \text{Na}(4s, 3d, 4p, 5s) + \text{Rb}^+$ à 5 keV. La ligne rouge en trait plein correspond au calcul MOCC avec la fonction de coupure introduite alors que la courbe en pointillés est le résultat lorsque cette fonction est retirée.

Transition vers l'état $\text{Na}(3p)$. Pour la voie de capture $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s) \rightarrow \text{Na}(3p) + \text{Rb}^+$ (figure 4.10), aucune oscillation n'apparaît et la distribution expérimentale est en très bon accord avec la distribution théorique. On peut également noter que la position en $E\theta$ du maximum de

la DCS diminue lorsque l'énergie augmente. Cela vient de l'augmentation de la contribution de l'état $\text{Na}(3p\sigma)$ qui passe, de 3.5% à 0.5 keV, à 13.3% à 5 keV. En effet, le pseudo-croisement entre la voie d'entrée et la voie menant à l'état $\text{Na}(3p\sigma)$ est à une distance inter-nucléaire plus grande que celui permettant la transition vers l'état $\text{Na}(3p\pi)$, ce qui implique des angles de diffusion plus petits pour la transition vers l'état $\text{Na}(3p\sigma)$.

Transition vers l'état $\text{Na}(3s)$. Pour la transition vers l'état $\text{Na}(3s)$, la distribution en angle de diffusion est reportée figure 4.11. A 0.5 keV, la statistique n'est pas suffisante pour avoir accès à cette distribution. L'accord des résultats expérimentaux avec les calculs théoriques est très satisfaisant. Dans ce cas, la transition se fait de manière unique et l'atome de rubidium joue le rôle d'un centre de diffraction. C'est la raison pour laquelle on observe ici des oscillations correspondant à la figure de diffraction de l'onde de matière associée au projectile. Si le processus est associé à un paramètre d'impact maximal b_{max} , ce processus se comporte comme une fonction pupille de rayon b_{max} . A partir de la figure 4.11, on obtient $b_{max} \simeq 11$ u.a., ce qui correspond bien aux $bP(b)$ de la figure 4.6. On attend alors des maxima séparés de $\frac{\lambda}{2b_{max}}$ sur la figure de diffraction. C'est la première fois pour ce système que ce phénomène de diffraction de Fraunhofer, prédit par le calcul, est mis en évidence expérimentalement. En effet, les masses élevées des particules et l'absence de voie d'entrée et de sortie coulombienne font que les angles de diffusions sont très petits.

Transitions vers les états $\text{Na}(4s, 3d, 4p, 5s)$. La dernière distribution observable à partir d'une capture électronique sur l'état fondamental du rubidium est une superposition de plusieurs transitions qui n'ont pas pu être déconvoluées expérimentalement. Ces transitions sont $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s) \rightarrow \text{Na}(4s, 3d, 4p, 5s) + \text{Rb}^+$. Dans ce cas, l'accord entre théorie et expérience n'est plus bon (figure 4.12), cet effet est principalement dû au fait que les transitions vers ces niveaux plus excités du sodium se font pour des b petits, typiquement inférieurs à 5 u.a., et qui, par conséquent, ne sont pas correctement décrits à cause de la fonction de coupure introduite dans les calculs théoriques. Un calcul sans cette fonction a été réalisé, le maxima obtenu paraît plus cohérent avec la distribution expérimentale. Néanmoins, la section efficace différentielle n'est toujours pas correctement reproduite. Cet écart n'est pas surprenant sachant que les calculs MOCC ne tiennent pas compte de la molécularisation des électrons des cœurs ioniques. Dans le cas présent, les distances internucléaires mises en jeu ne permettent pas de les supposer gelés. Cependant, pour un système aussi complexe que NaRb^+ il est impossible actuellement d'avoir une description réaliste de ce phénomène.

1.3.2 Système $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p)$

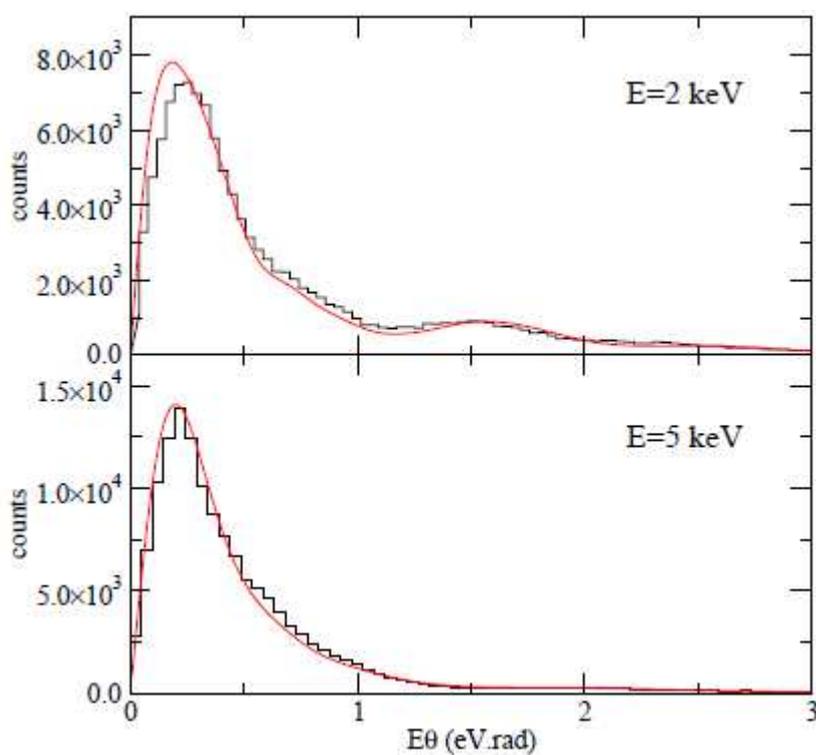


FIGURE 4.13: Distributions en angle de diffusion du projectile pour la voie $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(3p) + \text{Rb}^+$ à 2 keV et 5 keV.

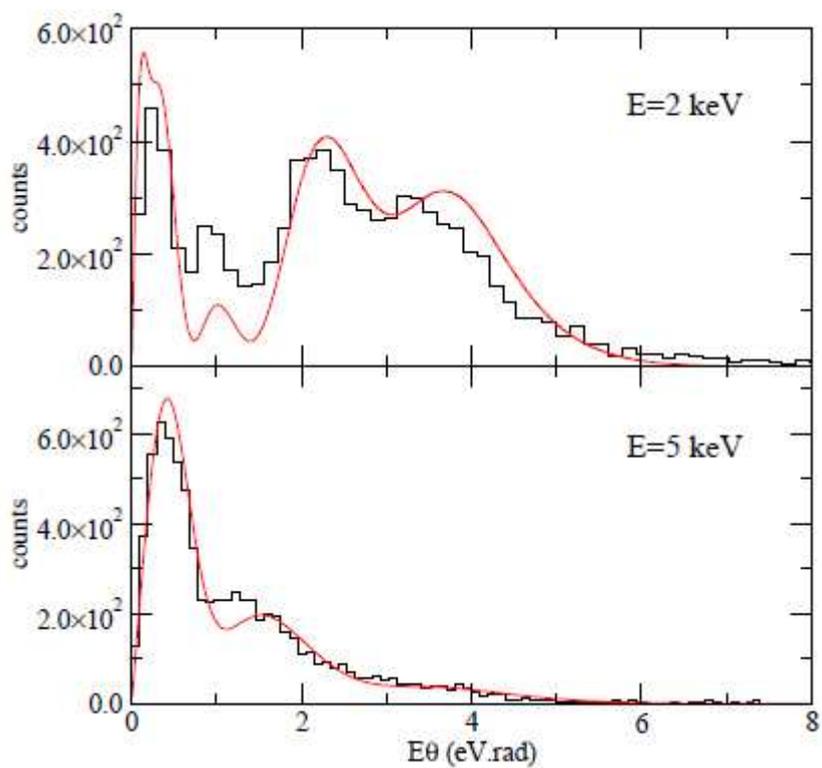


FIGURE 4.14: Distributions en angle de diffusion du projectile pour la voie $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(4s) + \text{Rb}^+$ à 2 keV (a) et 5 keV (b).

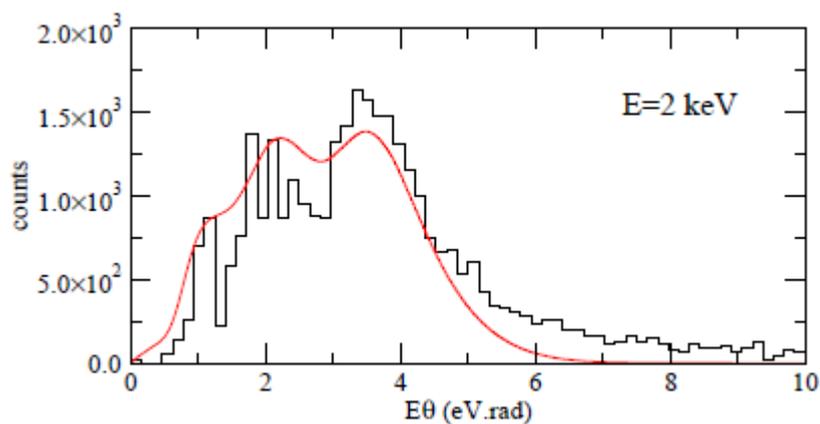


FIGURE 4.15: Distribution en angle de diffusion du projectile pour la voie $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(3d,4p) + \text{Rb}^+$ à 2 keV.

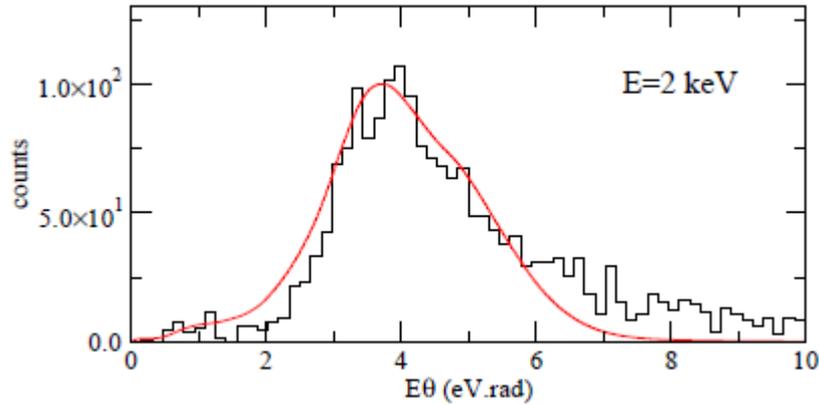


FIGURE 4.16: Distribution en angle de diffusion du projectile pour la voie $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(5s,4d,5p) + \text{Rb}^+$ à 2 keV.

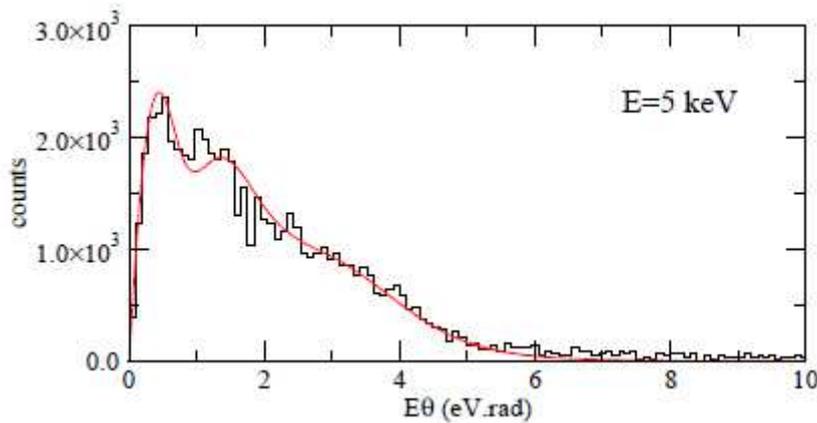


FIGURE 4.17: Distribution en angle de diffusion du projectile pour la voie $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(4s,3d,4p,5s,4d) + \text{Rb}^+$ à 5 keV.

Nous allons maintenant discuter les résultats obtenus pour l'échange de charge à partir de l'état 5p du rubidium. Les distributions obtenues ici sont issues d'une soustraction entre les distributions laser *on* et laser *off* en utilisant le paramètre α qui a été déterminé pour chaque énergie. Pour une énergie de 0.5 keV, aucune DCS n'a été représentée car la statistique est trop faible.

Transition vers l'état Na(3p). Le canal principal emprunté lors de la capture est celui qui place l'électron sur l'état 3p du sodium, les distributions en angle de diffusion lors de collisions à 2 et 5 keV pour ce canal sont présentées sur la figure 4.13. L'accord entre les calculs et les résultats expérimentaux est très bon. Le pic principal de cette distribution est situé à plus petit angle de diffusion que pour le cas $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5s)$ car la transition a lieu à plus grand paramètre d'impact (voir figure 4.2).

Transition vers l'état Na(4s). Sur la figure 4.14 sont présentées les distributions pour la voie $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(4s) + \text{Rb}^+$ pour des énergies cinétiques du projectile de 2 et 5 keV. Ces deux distributions affichent chacune un pic à petit angle de diffusion qui correspond à un rayon de capture très grand issu d'un couplage faible autour de $R = 25$ u.a. entre $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p\sigma)$ et $\text{Na}(4s) + \text{Rb}^+$. La seconde contribution, beaucoup plus large, est centrée autour de 3 eV.rad et provient du couplage qui s'effectue au pseudo-croisement autour de $R = 11$ u.a. Cette contribution tend à disparaître lorsque l'énergie du projectile augmente.

Transitions vers les états Na(3d,4p). A 2 keV, notre dispositif nous permet de séparer les distributions correspondant aux transitions vers les états 3d et 4p du sodium de celles associées aux états 5s, 4d et 5p. La figure 4.15 présente la distribution obtenue pour ce premier groupe de transitions tandis que la figure 4.16 montre la distribution du second groupe de transitions.

La distribution de la figure 4.15 ressemble à celle de la transition $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(4s) + \text{Rb}^+$ car la majorité du flux d'électrons terminant sur l'état Na(3d), qui d'après les calculs représente 90% de la distribution (3d+4p), effectue préalablement une transition radiale vers l'état Na(4s).

Transitions vers l'état Na(4s,3d,4p,5s,4d). L'ensemble de transition $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(4s,3d,4p,5s,4d) + \text{Rb}^+$ à 5 keV n'ont pas pu être isolées les unes des autres. Cette distribution est présentée sur la figure 4.17. Cette dernière distribution est en très bon accord avec le calcul MOCC. Contrairement aux transitions vers des états de nl élevé à partir du Rb(5s), le calcul est ici plus réaliste car les transitions impliquées se font à plus grands paramètres d'impact que lorsque la cible est dans son état fondamental Rb(5s).

1.4 Conclusion

Nous avons utilisé la technique MOTRIMS afin d'étudier le processus d'échange de charge à basse énergie pour des collisions $\text{Na}^+ + {}^{87}\text{Rb}(5s,5p)$. La cible froide produite par le MOT, la commutation du champ magnétique de piégeage durant l'acquisition des données, l'extraction transverse et les propriétés de focalisation du spectromètre permettent d'accroître la résolution sur la mesure de l'impulsion des ions de recul et d'avoir un rapport *signal/bruit* très favorable. Ces performances rendent possible la mesure de sections efficaces relatives, y compris pour des voies de capture très faiblement peuplées ainsi que la reconstruction des angles de diffusion du projectile avec une grande précision.

Le tableau 4.3 regroupe les résolutions expérimentales sur les composantes de l'impulsion des ions de recul pour notre dispositif ainsi que celles de dispositifs similaires dédiés aux mêmes études.

Conjointement, nous avons mené des calculs semi-classiques dans le cadre d'une approche MOCC en considérant l'approximation SAE (*Single active electron*). Nous avons particulièrement prêté attention à la description des états des deux centres. Les énergies sont obtenues par la méthode des potentiels modèles en utilisant des bases STO (*Slater type orbital*) suffisamment complètes.

Les figures de diffraction prédites par les calculs, pour les sections efficaces différentielles, ont clairement été mises en évidence par l'expérience. Le dispositif optimisé a permis d'aller au delà des résultats précédemment obtenus par Blieck [56]. Néanmoins, d'autres figures de diffraction prédites pour les DCSs de transitions s'effectuant à grandes distances internucléaires

Expérience	Extraction du spectromètre	Switch du champ magnétique lors de l'acquisition	$\Delta P_{R//}^f$ (u.a.)	$\Delta P_{R\perp,y}^f$ (u.a.)	$\Delta P_{R\perp,z}^f$ (u.a.)
KSU [76]	longitudinale	Non	0.03	-	-
KVI [77]	transverse	Oui	0.07	0.07	-
LPC-MOT	transverse	Oui	0.05	0.05	~ 0.05
MPI [25]	longitudinale	Oui	0.025	0.04	0.04

TABLE 4.3: Résolutions expérimentales sur les composantes longitudinales et transverses de l'impulsion de l'ion de recul pour les différents dispositifs existants.

ne sont toujours pas résolues. Par exemple, la transition $\text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(3p)$ qui a lieu dans une gamme de paramètres d'impact tels que $b \lesssim 25$ u.a. implique que l'espacement angulaire relatif de deux maxima successifs est d'environ $64 \mu\text{rad}$ à 2 keV. Pour résoudre clairement ces oscillations, la résolution expérimentale devrait atteindre environ $25 \mu\text{rad}$. Ceci est envisageable avec la technique MOTRIMS en diminuant la tension d'extraction du spectromètre, afin que les distributions des ions de recul sur le détecteur soient plus étalées.

Au delà de l'observation de ces figures de diffraction, les résultats expérimentaux constituent un test très sévère pour les calculs théoriques. Dans le cas présent, les calculs MOCC ont fourni une bonne description de la capture électronique via les sections efficaces relatives et les DCSs qui sont en très bon accord avec celles issues de l'expérience. L'expérience présentée ici a également montré les limites de l'approximation SAE qui consiste à supposer les électrons de cœurs gelés. Lorsque les distances internucléaires sont faibles et que les cœurs ioniques se recouvrent, cette approximation ne permet pas de décrire les transitions fortement inélastiques. Heureusement, la contribution de ces processus à la section efficace totale reste faible. Une description *ab initio* de la molécularisation des cœurs serait nécessaire pour décrire ces processus.

2 Étude de la capture électronique sur cibles polarisées

Les expériences effectuées sur cible orientée lors de cette thèse visent à tester les modèles théoriques de manière encore plus sévère. Ces expériences sont actuellement les seules permettant l'observation des DCSs avec une haute résolution lors de collisions avec des états orientés. Les résultats expérimentaux et théoriques seront également comparés aux prédictions de modèles plus simples tels que le *velocity matching* [78] et les *propensity rules* [79].

Les principaux travaux expérimentaux effectués pour l'étude de capture électronique à partir de cible orientées ou alignées sont ceux de D. Doweck, J. C. Houver, T. Royer et M. Machholm. Ils commencèrent par étudier l'évolution des sections efficaces relatives de capture pour le système $\text{H}^+ + \text{Na}(3s,3p)$ [80, 13]. Une première estimation des angles de diffusion du projectile fût également présentée mais la résolution de leur dispositif ne permettait pas de discuter de l'effet d'orientation sur ces observables. Par la suite, la modification de leur dispositif [81] a permis d'observer une asymétrie des angles de diffusion dans la direction transverse à l'axe d'orientation lors de collisions $\text{H}^+ + \text{Na}(3p)$. Enfin, une étude très complète a été effectuée par Doweck [82], pour des collisions $\text{H}^+ + \text{Na}(3p)$, et une autre par Machholm [57] pour des collisions $\text{Li}^+ + \text{Na}(3p)$.

Dans ces travaux, l'évolution des sections efficaces relatives en fonction de l'alignement ou de l'orientation de la cible est décrite ainsi que la modification des DCSs. Dans ces dernières études, la cible était produite dans des états orientés comme dans le présent travail, mais également dans des états alignés à 45° de l'axe d'incidence du projectile. Ces résultats ont également été comparés à des calculs théoriques de trajectoire classique Monte-Carlo (CTMC pour *Classical Trajectories Monte-Carlo*) et de *close-coupling* comparables à ceux utilisés dans cette thèse.

2.1 Résultats expérimentaux et théoriques

2.1.1 Sections efficaces différentielles

Dans ces expériences, seules les voies de capture ayant pour état de départ le $\text{Rb}(5p)$ sont pertinentes si l'on veut mettre en évidence une asymétrie dans la diffusion du projectile. Comme nous l'avons vu dans le chapitre 2, la capture à partir de l'état fondamental $5s$ du rubidium n'est pas affectée par l'orientation, car dans ce cas, la fonction d'onde de l'électron actif est indépendante de l'orientation du moment cinétique total. Trois expériences ont été réalisées, pour des énergies de 1, 2 et 5 keV afin de mettre en évidence une éventuelle évolution de l'asymétrie observée en fonction de la vitesse du projectile. La légère dégradation de la résolution due à la technique de polarisation des atomes (voir chapitre 2) n'a permis d'étudier l'échange de charge avec des cibles orientées que pour deux voies de capture $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(3p) + \text{Rb}^+$ et $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(4s) + \text{Rb}^+$.

Comme nous l'avons vu, la cible est produite dans deux états de moment angulaire orientés dans des sens opposés, correspondant aux sous niveaux Zeeman $m_F = -3$ et $m_F = +3$. L'orientation de la cible dans les deux sens permet de s'assurer que l'asymétrie observée (figure 4.18) n'est pas le résultat d'un artefact dû au dispositif expérimental. Les DCSs sont ensuite intégrées dans quatre quadrants afin d'être comparées aux résultats théoriques. Comme attendu, lorsque l'état initial est $m_F = -3$, la distribution en angle de diffusion est similaire à celle obtenue à partir d'un état de départ $m_F = +3$ après rotation de l'angle φ (angle azimutal) égale à π . En utilisant cette propriété, on additionnera les deux distributions après rotation de la distribution obtenue avec pour état de départ $\text{Rb}(5p; m_F = -3)$, on augmente ainsi la statistique tout en atténuant d'éventuels effets d'asymétrie dus aux imperfections du dispositif.

Conventions pour les distributions en angle de diffusion intégrées. Dans la suite, la comparaison théorie/expérience ne sera faite que dans le cas de collisions sur une cible dans l'état $\text{Rb}(5p; m_F = +3)$. La comparaison des sections efficaces différentielles intégrées est présentée sur les figures 4.19 et 4.20. Ces distributions sont issues de l'intégration des distributions bidimensionnelles dans les quatre quadrants présentés sur la figure 4.18.

Pour les quadrants (2) et (4), dont la médiane est colinéaire à l'axe de quantification, les angles de diffusion sont pris négatifs ($\theta < 0$) pour le quadrant (4) et positifs ($\theta > 0$) pour le quadrant (2). Pour ces distributions, on attend une symétrie de part et d'autre de $\theta = 0$ car la fonction d'onde de l'électron actif est symétrique de part et d'autre du plan orthogonal à l'axe de quantification.

Pour les quadrants (1) et (3), dont la médiane est orthogonale à l'axe de quantification, les angles de diffusion sont pris négatifs ($\theta < 0$) pour le quadrant (1) et positifs ($\theta > 0$) pour le quadrant (3). Pour ces distributions, on attend une asymétrie de part et d'autre de $\theta = 0$ car la rotation du nuage électronique fait que la vitesse relative entre le projectile et l'électron actif

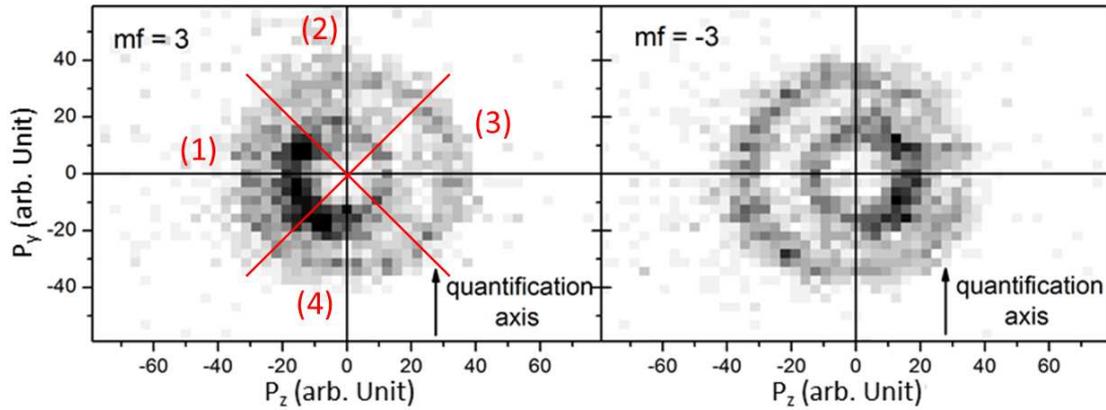


FIGURE 4.18: Distributions en impulsion transverse des ions de recul pour la collision $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p; m_F = \pm 3) \rightarrow \text{Na}(4s) + \text{Rb}^+$ à une énergie de 1 keV.

est différente lorsque le projectile passe d'un côté ou de l'autre de la cible.

Il est important de noter ici, que les distributions présentées sur la figure 4.18 sont celles relatives à l'ion de recul. L'impulsion des projectiles est inversée par rapport à celles de l'impulsion de l'ion de recul car on a $\vec{P}_P^f = -\vec{P}_R^f$.

Les figures 4.19 et 4.20 donnent les distributions en angle de diffusion du projectile, intégrées selon les conditions qui viennent d'être énoncées. Les colonnes de gauche présentent les distributions intégrées pour les quadrants (1) et (3), et celles de droite les distributions intégrées pour les quadrants (2) et (4).

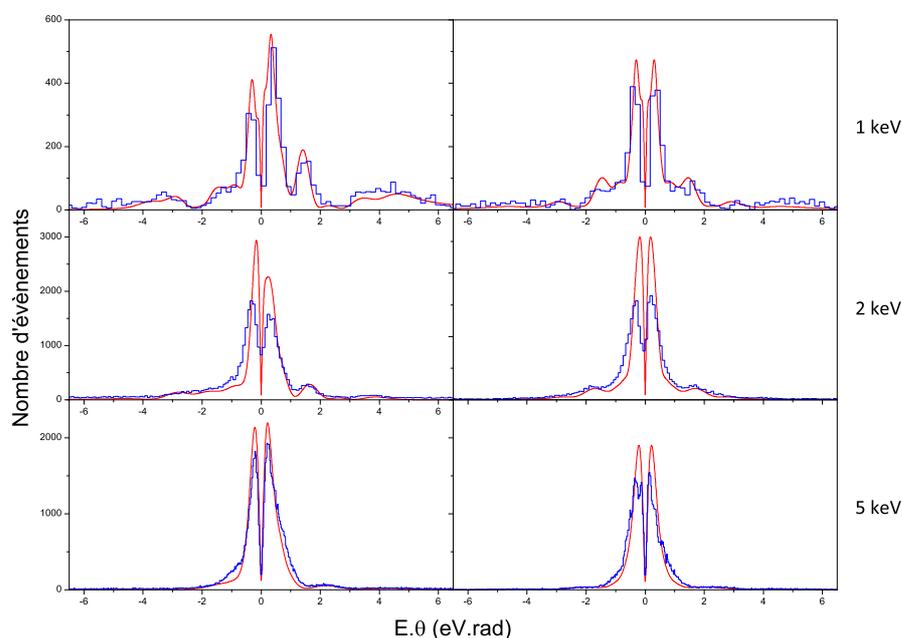


FIGURE 4.19: Distributions en angle de diffusion du projectile intégrées dans les quadrants (2) et (4) (colonne droite) et dans les quadrants (1) et (3) (colonne gauche) pour la collision $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p; m_F = +3) \rightarrow \text{Na}(3p) + \text{Rb}^+$. De haut en bas les énergies du projectile sont respectivement 1, 2 et 5 keV. Les résultats expérimentaux sont en bleu et les résultats théoriques en rouge.

Pour les distributions correspondant aux transitions $\text{Rb}(5p; m_F = +3) \rightarrow \text{Na}(3p)$ (figure 4.19), on voit que notre dispositif expérimental nous permet de résoudre les oscillations présentes. Pour la colonne de gauche, l'asymétrie attendue est observée et l'on favorise légèrement les angles de diffusion positifs. Pour la colonne de droite, la symétrie des distributions est bien visible. On remarque que l'accord entre les calculs théoriques et les résultats expérimentaux est excellent.

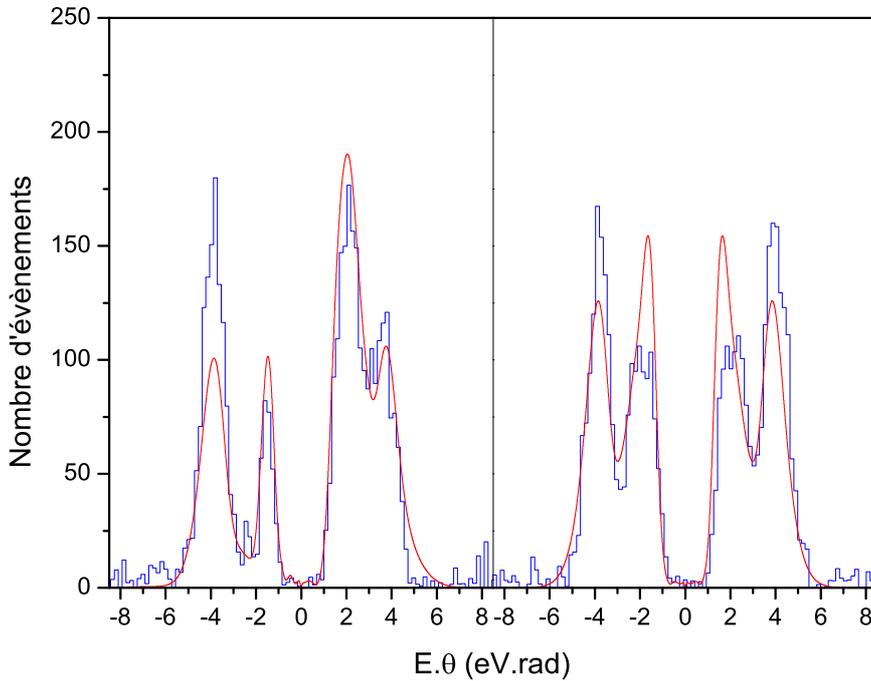


FIGURE 4.20: Distributions en angle de diffusion du projectile intégrées dans les quadrants (2) et (4) (colonne droite) et dans les quadrants (1) et (3) (colonne gauche) pour la collision $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p; m_F = +3) \rightarrow \text{Na}(4s) + \text{Rb}^+$ à 1 keV. Les résultats expérimentaux sont en bleu et les résultats théoriques en rouge.

Pour les deux distributions en angle de diffusion du projectile relatives à la transition $\text{Rb}(5p; m_F = +3) \rightarrow \text{Na}(4s)$ (voir figure 4.20), l'accord global est moins bon que pour les distributions associées à la transition $\text{Rb}(5p; m_F = +3) \rightarrow \text{Na}(3p)$. Le calcul prédit correctement la position des pics. En revanche, on observe un léger désaccord en ce qui concerne leurs amplitudes. L'amplitude du pic le plus extérieur ($|E\theta| \sim 4$ eV.rad) est toujours sous-estimé par les calculs. Pour ces grands angles de diffusion, il est envisageable que ce désaccord soit la conséquence de la fonction de coupure F_{cut} et l'approximation SAE. Des tests ont été réalisés en modifiant les bornes sur les paramètres d'impacts de la fonction de coupure et même en supprimant celle-ci, mais les distributions observées ne permettent pas d'affirmer que cette fonction de coupure est l'origine du désaccord observé. L'amplitude du pic tel que $|E\theta| \sim 2$ eV.rad est quant à elle bien évaluée par les calculs pour la distribution asymétrique, issue des quadrants (1) et (3), et surestimé pour la distribution symétrique, issue des quadrants (2) et (4). Globalement, les probabilités de capture menant à une diffusion du projectile vers les $E\theta$ positifs ou négatifs sont comparables. C'est seulement grâce à la résolution expérimentale, permettant d'observer les deux contributions aux angles de diffusion de ~ 4 et ~ 2 eV.rad, que l'on peut mettre en évidence l'asymétrie.

Ces résultats, dans l'ensemble très satisfaisants, permettent de valider le calcul théorique MOCC afin de l'utiliser pour les analyses qui vont suivre.

2.1.2 Caractérisation du potentiel d'interaction entre les centres nucléaires.

En regardant conjointement les sections efficaces différentielles en angle de diffusion et les distributions de probabilités $bP(b)$, il est également possible d'en tirer une information quant à l'action du potentiel entre les deux centres.

Dans la suite, pour alléger les notations, nous désignerons les états orientés de la manière suivante, $A(nl_{\pm 1})$. A représente le centre sur lequel l'électron est attaché, Rb ou Na, nl sont les nombres quantiques de l'état considéré et l'indice ± 1 représente respectivement les sous niveaux $m_F = \pm 3$.

Les figures 4.21 et 4.22 montrent conjointement les distributions de la probabilité $bP(b)$ et les DCSs dans le plan transverse à l'axe d'incidence du faisceau projectile. Sur ces figures, il est possible de relier les différentes contributions entre les probabilités $bP(b)$ et les angles de diffusion afin d'en déduire si le potentiel est globalement attractif ou répulsif.

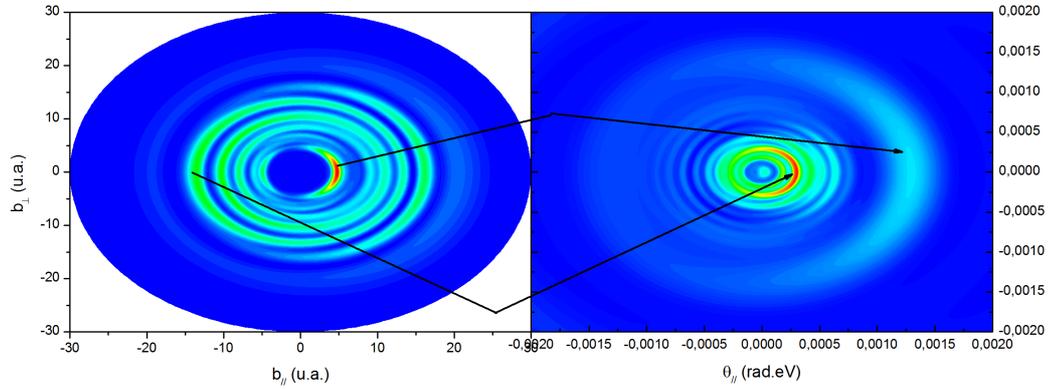


FIGURE 4.21: Comparaison de la distribution en angle de diffusion et de la distribution de probabilité $bP(b)$ pour la transition $\text{Rb}(5p_{+1}) \rightarrow \text{Na}(3p)$ à 1 keV.

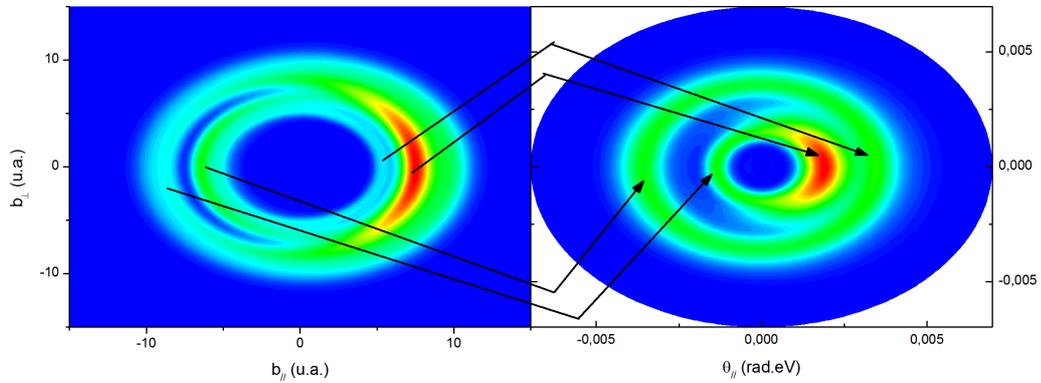


FIGURE 4.22: Comparaison de la distribution en angle de diffusion et de la distribution de probabilité $bP(b)$ pour la transition $\text{Rb}(5p_{+1}) \rightarrow \text{Na}(4s)$ à 1 keV.

Pour les distributions en $bP(b)$, sur l'axe horizontal, les paramètres d'impact négatifs ($b_{//} < 0$) correspondent à une collision lorsque le projectile est passé à gauche de la cible. Si le projectile est passé à droite de la cible, on aura un paramètre d'impact positif ($b_{//} > 0$) sur cet axe horizontal.

Pour les distributions en angle de diffusion, sur l'axe horizontal, les $E\theta$ négatifs correspondent à un projectile diffusé vers la gauche, indépendamment de son passage d'un côté ou de l'autre de la cible. Les $E\theta$ positifs correspondent à un projectile diffusé vers la droite, toujours indépendamment de son passage d'un côté ou de l'autre de la cible.

La figure 4.23 donne schématiquement l'action d'un potentiel attractif ($V(r) < 0$) ou répulsif ($V(r) > 0$) entre les deux centres lors de la collision.

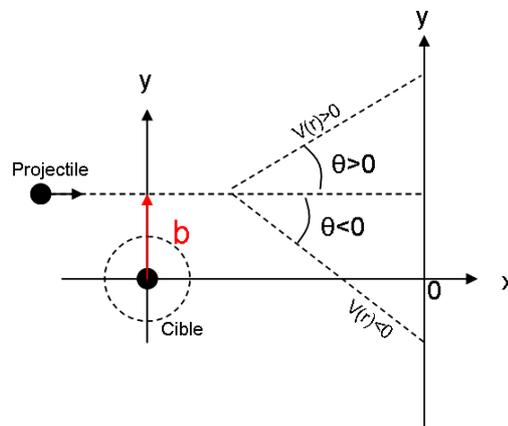


FIGURE 4.23: Représentation schématique de la diffusion des projectiles sous l'effet d'un potentiel attractif ($V(r) < 0$) ou répulsif ($V(r) > 0$).

L'approximation semi-classique qui associe à un projectile une trajectoire, avec un paramètre d'impact b et un angle de diffusion θ , nous permet d'identifier les contributions observées sur les $bP(b)$ et les DCSs, sachant que des b petits donneront lieu à de grands angles de diffusion et inversement.

On voit (figure 4.23) qu'un potentiel attractif ($V(r) < 0$) aura tendance à donner lieu à des paramètres d'impact et des angles de diffusion de signe opposé. Alors qu'un potentiel répulsif ($V(r) > 0$) aura tendance à donner lieu à des paramètres d'impact et des angles de diffusion de même signe.

Sur la figure 4.21, pour les grands paramètres d'impact, les maxima en $bP(b)$ donnent lieu à des maxima en angle de diffusion de signe opposé, ce qui indique que le potentiel d'interaction lors de capture électronique vers l'état $\text{Na}(3p)$ est plutôt attractif. Pour les petits paramètres d'impact, le comportement est opposé, ce qui laisse penser que le potentiel est plutôt répulsif. Pour la voie de capture conduisant à l'état $\text{Na}(4s)$ du sodium (figure 4.22), les maxima en $bP(b)$ donnent lieu à des maxima en angle de diffusion de même signe, ce qui indique que le potentiel est cette fois globalement répulsif.

2.2 Modèles simples pour la capture sur cible orientée

La validation du calcul MOCC permet de confronter ses résultats à des modèles simples visant à prédire les transitions favorisées ou défavorisées lors de collisions. Ces modèles sont les *propensity rules*, introduites par Andersen et Nielsen [79] et le modèle du *velocity matching* proposé par Kohring [78]. Les comparaisons faites avec les résultats expérimentaux sont indicatives car ces deux modèles ont été élaborés pour des vitesses de projectile proches de la vitesse de l'électron actif. La vitesse de l'électron actif peut ici être évaluée approximativement :

$$v_e \simeq \frac{1}{r_a} \simeq \frac{1}{r_b} \sim \frac{1}{r} \sim \frac{2}{b_{moy}} \quad (4.1)$$

Ces expressions sont déduites de celles du moment angulaire de l'électron sur les états p du sodium et du rubidium :

$$\begin{cases} L = r_a v_e = 1 \\ L = r_b v_e = 1 \end{cases} \quad (4.2)$$

avec

$$b_{moy} = \langle r_a \rangle + \langle r_b \rangle \simeq 2\langle r \rangle \quad (4.3)$$

où b_{moy} est le paramètre d'impact moyen et $\langle r_a \rangle$, $\langle r_b \rangle$ les rayons moyens du sodium et du rubidium. Pour l'état Na(3p), on a $\langle r_a \rangle = 5.82$ u.a. et pour Rb(5p), $\langle r_b \rangle = 7.15$ u.a.

Finalement, la vitesse de l'électron est environ de 0.15 u.a., ce qui correspondrait à un projectile Na⁺ de 13 keV d'énergie cinétique, ce qui est supérieur aux énergies étudiées. La plus haute énergie des expériences réalisées, de 5 keV, correspond à une vitesse du projectile telle que : $v_P = 0.62v_e$.

2.2.1 Les règles de propension (*propensity rules*)

Les règles de propension sont issues de l'approximation de phase stationnaire utilisée pour traiter l'excitation. Ces règles ont été introduites par Andersen et Nielsen [83] pour traiter l'orientation et l'alignement lors de collisions atomiques. La variation de la projection du moment angulaire total, lorsque l'électron est capturé, peut s'exprimer en fonction de la variation d'énergie potentielle du système au cours de la collision.

Pour une trajectoire où le projectile passe à gauche de la cible ($b < 0$ suivant les conventions prises précédemment), cette relation se met sous la forme :

$$\frac{\Delta\varepsilon_{if}a_{if}}{v_M} \sim -\Delta m_{if}\pi \quad (4.4)$$

où v_M est la vitesse relative entre l'électron et le projectile et a_{if} la longueur d'interaction de la transition [83]. Cette paramétrisation permet de dire que pour des processus exothermiques ($\Delta\varepsilon_{if} = \varepsilon_f - \varepsilon_i < 0$), les transitions pour lesquelles la variation de la projection du moment angulaire total, de la cible vers le projectile, est positive ($\Delta m_{if} = m_f - m_i > 0$), seront favorisées. C'est le cas de la transition Rb(5p) \rightarrow Na(3p) avec un Q de réaction de ~ 0.4 eV. Si l'état de départ est le Rb(5p₋₁), la transition privilégiée sera Rb(5p₋₁) \rightarrow Na(3p₊₁) alors que Rb(5p₋₁) \rightarrow Na(3p₋₁) aura une contribution plus faible. Pour le cas d'une collision avec une

cible dans l'état $\text{Rb}(5p_{+1})$, la transition $\text{Rb}(5p_{+1}) \rightarrow \text{Na}(3p_{+1})$ est également faible et enfin, la transition $\text{Rb}(5p_{+1}) \rightarrow \text{Na}(3p_{-1})$ est négligeable.

Si l'on considère des processus de capture électronique endothermiques, pour lesquels le projectile perd de l'énergie cinétique lors de la collision, ces règles s'inversent. C'est le cas lors des transitions $\text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(4s)$. On s'attend alors à privilégier la transition $\text{Rb}(5p_{+1}) \rightarrow \text{Na}(4s)$ lorsque le projectile passe à gauche de la cible.

De même, si l'on considère une trajectoire où le projectile passe à droite de la cible ($b > 0$), les règles s'inversent.

2.2.2 Modèle du *velocity matching*

La seconde approche, proposée par Kohring [78] et revisitée par Campbell [84], permet d'appréhender les probabilités associées aux différentes transitions : c'est la méthode du *velocity matching*. Cette méthode, également adaptée aux vitesses de projectile proches de la vitesse de l'électron actif, prévoit que les transitions favorisées lors de la capture électronique sont celles pour lesquelles la vitesse de l'électron actif et du projectile sont de même sens. Une variation du moment angulaire de l'électron nulle, lors de son passage de la cible au projectile, favorisera également la transition. Les schémas de la figure 4.24 donnent une vision simple des configurations possibles.

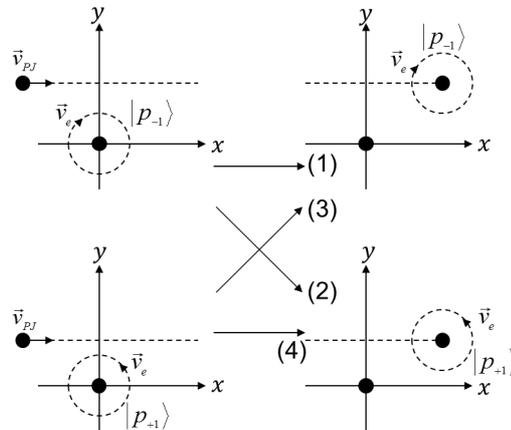


FIGURE 4.24: Représentation schématique des différentes transitions possibles lors de collisions sur cible polarisées. Ce modèle prévoit une capture préférentielle lorsque la vitesse du projectile et de l'électron schématiquement représentées ici sont colinéaires. Les flèches numérotées de (1) à (4) représentent les transitions $p \rightarrow p$ possibles de l'électron pour les valeurs de $m_l = \pm 1$.

Pour la transition $\text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Na}(3p)$, si le projectile passe à gauche de la cible, la transition privilégiée sera $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(3p_{-1})$ (voie (1) sur la figure 4.24) puis avec une probabilité plus faible $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(3p_{+1})$ (voie (2) sur la figure 4.24) et $\text{Rb}(5p_{+1}) \rightarrow \text{Na}(3p_{-1})$ (voie (3) sur la figure 4.24), et pour finir, la transition la moins probable sera $\text{Rb}(5p_{+1}) \rightarrow \text{Na}(3p_{+1})$ (voie (4) sur la figure 4.24).

2.3 Confrontation des modèles

Nous allons maintenant présenter les distributions en $bP(b)$ issues du calcul MOCC pour les transitions étudiées (figures 4.25 à 4.28). Pour les transitions vers l'état $\text{Na}(3p)$, on distinguera les états finaux $\text{Na}(3p_{-1})$, $\text{Na}(3p_{+1})$ et $\text{Na}(3p_0)$. Le cas des transitions vers l'état $\text{Na}(3p_0)$ n'est pas traité ici. Pour une transition vers l'état $\text{Na}(4s)$, la voie de sortie est unique.

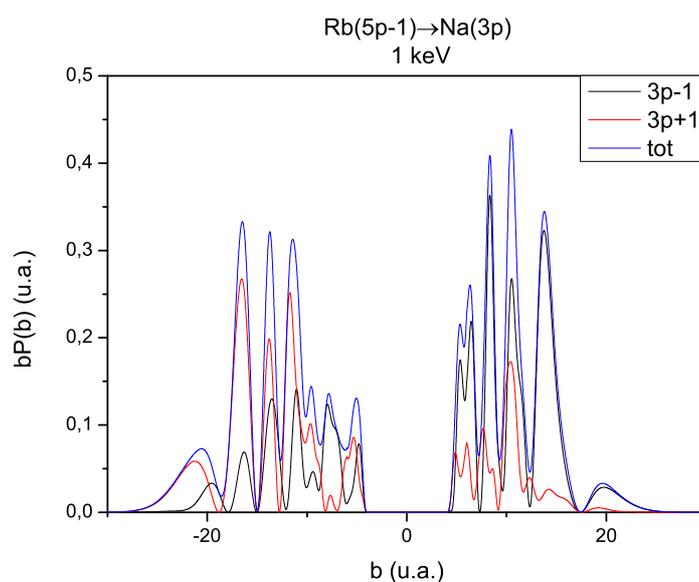


FIGURE 4.25: Distributions de probabilités théoriques $bP(b)$ en fonction du paramètre d'impact pour les transitions $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(3p_{\pm 1})$ à 1 keV.

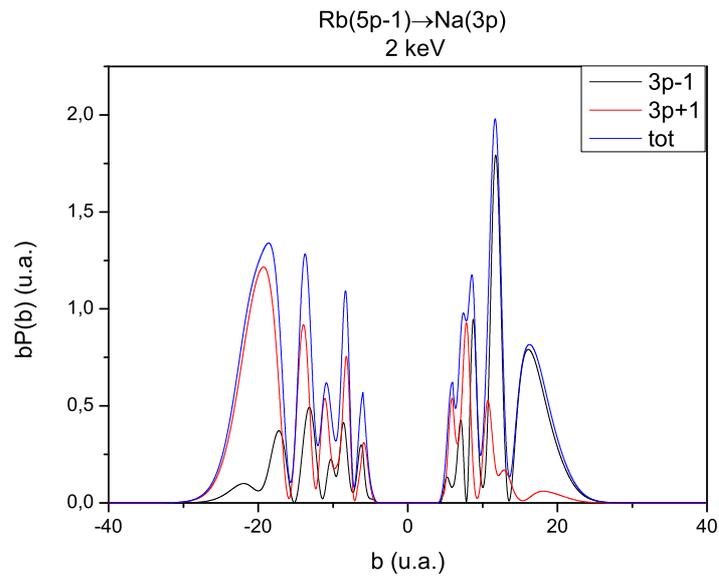


FIGURE 4.26: Distributions de probabilités théoriques $bP(b)$ en fonction du paramètre d'impact pour les transitions $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(3p_{\pm 1})$ à 2 keV.

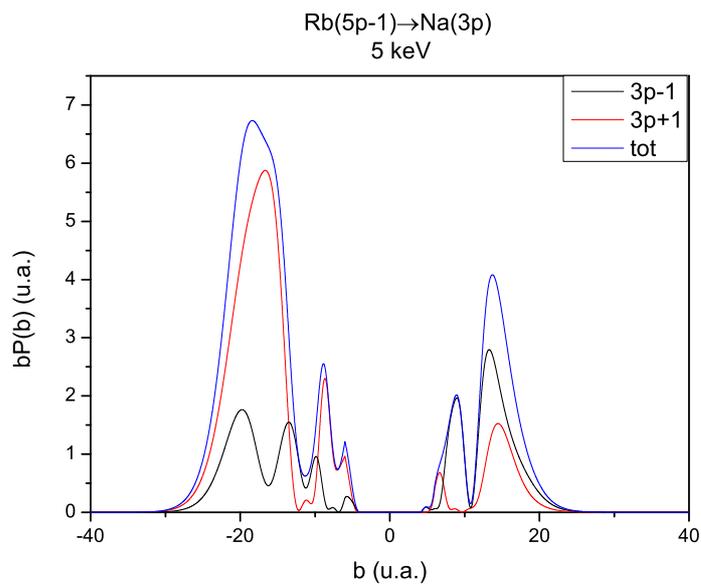


FIGURE 4.27: Distributions de probabilités théoriques $bP(b)$ en fonction du paramètre d'impact pour les transitions $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(3p_{\pm 1})$ à 5 keV.

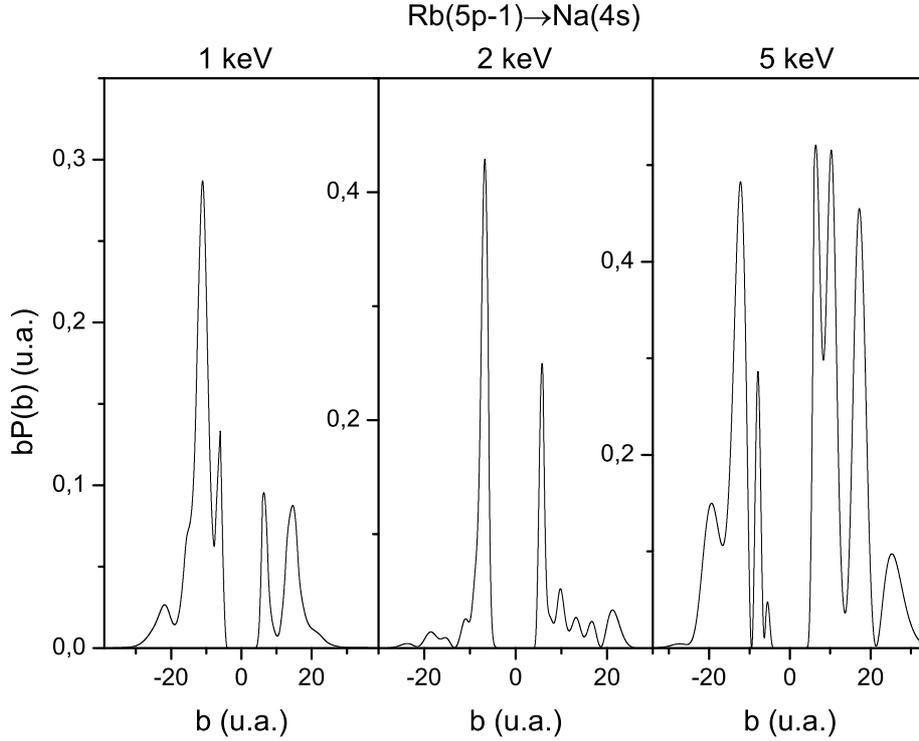


FIGURE 4.28: Distributions de probabilités théoriques $bP(b)$ en fonction du paramètre d'impact pour les transitions $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(4s)$ à 1, 2 et 5 keV.

Pour les transitions $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(3p)$ (figures 4.25 4.26 4.27), on voit nettement une capture préférentielle vers l'état $\text{Na}(3p_{+1})$ lorsque le projectile passe à gauche de la cible ($b_{//} < 0$). Le modèle des *propensity rules* prédit correctement ce comportement (paragraphe 2.2.1). Le modèle du *velocity matching*, qui prédit l'inverse est en désaccord sur ce point avec le calcul MOCC. Le modèle du *velocity matching* prédit également une capture préférentielle pour cette collision lorsque le projectile passe à gauche de la cible. A 1 et 2 keV, cet effet n'est pas franchement notable, mais il le devient à 5 keV. Il semblerait donc qu'à ces énergies, la variation d'énergie potentielle du système $\Delta\varepsilon_{if}$ joue un rôle, ce qui expliquerait le désaccord avec le modèle du *velocity matching*.

Pour la transition $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(4s)$, la capture est privilégiée si le projectile passe à gauche de la cible à 1 keV et à droite de la cible à 5 keV. A 2 keV, la probabilité de capture est équivalente pour les deux trajectoires. Dans ce cas, aucun des deux modèles ne permet de prédire ce comportement. Les *propensity rules* qui prédisent une capture préférentielle pour la transition $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(4s)$ lorsque le projectile passe à droite de la cible sont en accord avec le calcul MOCC à 5 keV mais pas à 1 et 2 keV. Le *velocity matching*, lui, prédit une capture préférentielle pour la même transition lorsque le projectile passe à gauche de la cible, est en accord avec le calcul MOCC à 1 keV mais pas à 2 et 5 keV.

Pour des vitesses de projectile inférieures à la vitesse de l'électron, la capture préférentielle $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(3p_{-1})$, prédite par le *velocity matching*, dans les conditions présentes, n'a pas été observée dans les travaux de Machholm [57] et Doweck [82]. En revanche, Doweck observe ce comportement lorsque $v_P \geq v_e$.

Puisque les deux modèles qui viennent d'être discutés ont été élaborés pour des vitesses de projectile tel que $v_P \geq v_e$ (v_P est la vitesse du projectile et v_e la vitesse de l'électron), nous avons alors réalisé des calculs MOCC pour une énergie de 150 keV.

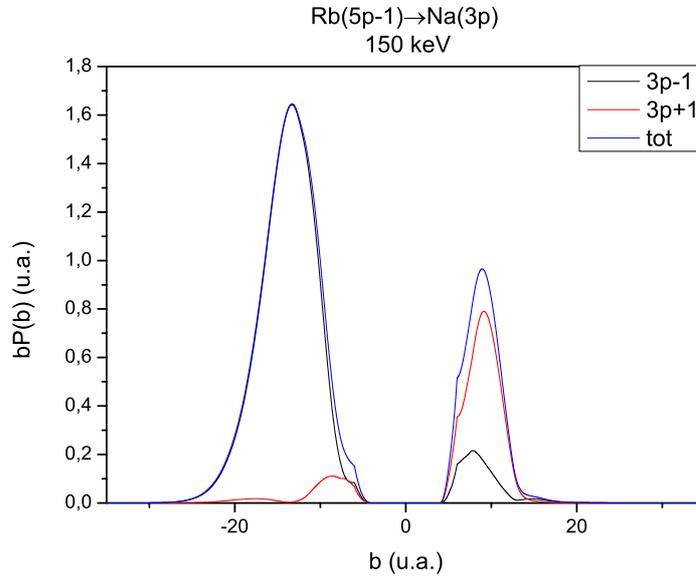


FIGURE 4.29: Distributions de probabilités théoriques $bP(b)$ en fonction du paramètre d'impact pour les transitions $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(3p)$ à une énergie de 150 keV.

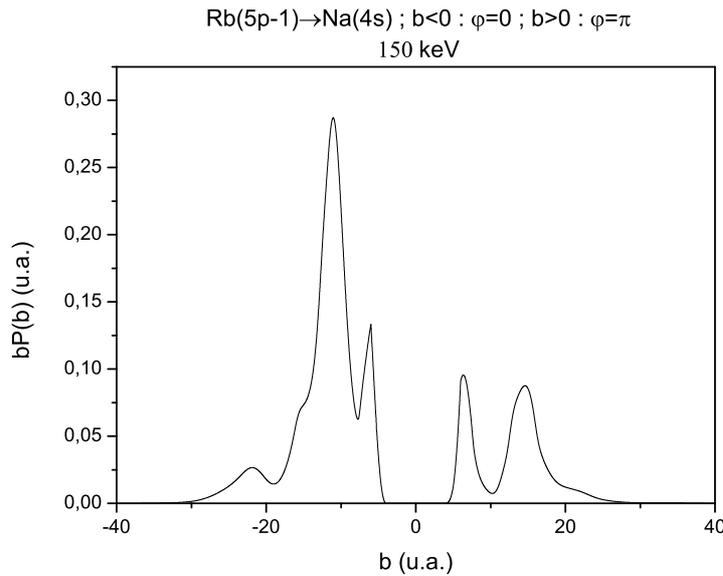


FIGURE 4.30: Distributions de probabilités théoriques $bP(b)$ en fonction du paramètre d'impact pour les transitions $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(4s)$ à une énergie de 150 keV.

Les figures 4.29 et 4.30 donnent respectivement les distributions des probabilités $bP(b)$ pour les transitions $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(3p_{-1}, 3p_{+1})$ et $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(4s)$. Cette fois on voit clairement que pour un projectile passant à gauche de la cible, la transition $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(3p_{-1})$ est favorisée par rapport à la transition $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(3p_{+1})$. Pour la transition $\text{Rb}(5p_{-1}) \rightarrow \text{Na}(4s)$, on voit que la capture est favorisée lorsque le projectile passe à gauche de la cible. Ces deux observations sont en accord avec ce que prédit le modèle du *velocity matching* mais opposé au comportement prédit par les *propensity rules*.

Dans le domaine de validité de ces deux modèles ($v_P \gtrsim v_e$), c'est le modèle de *velocity matching* qui fournit la meilleure description.

Nous avons développé des outils, expérimentaux et théoriques, permettant d'étudier le processus de capture électronique lors de collisions ion-atome sur cible orientée $\text{Na}^+ + \text{Rb}(5p; m_F = +3)$. La comparaison des résultats théoriques et expérimentaux nous permet de valider le calcul MOCC réalisé. Nous avons ensuite comparé les résultats de ce calcul avec les prédictions fournies par des modèles plus simples. Ces modèles sont les *propensity rules* et le *velocity matching*. Pour les énergies étudiées expérimentalement, ni le *velocity matching*, ni les *propensity rules* ne fournissent une description globale correcte. En effet, les vitesses du projectiles sont trop faibles et donc sa vitesse inférieure à celle de l'électron actif. Lorsqu'on augmente l'énergie pour les calculs MOCC, la description du *velocity matching* est en bon accord avec nos calculs.

Conclusion et perspectives

Conclusion

Nous rappelons au lecteur que l'objectif de ce travail est l'étude théorique et expérimentale du processus de simple capture électronique à basse énergie pour le système $\text{Na}^+ + {}^{87}\text{Rb}$. Afin d'obtenir des informations les plus précises possible sur les mécanismes mis en jeu lors de ces collisions, nous avons choisi d'utiliser les outils les plus performants tant pour les calculs que pour les expériences. Ainsi, un dispositif de type MOTRIMS a été développé au LPC-CAEN, couplant un spectromètre d'impulsion d'ion de recul à focalisation et un piège magnéto-optique permettant de produire des cibles atomiques très froides. Conjointement, nous avons développé un calcul MOCC, dans le cadre de l'approximation semi-classique après avoir vérifié qu'un calcul purement quantique fournit les mêmes résultats. Ces deux études, théorique et expérimentale, permettent d'obtenir les sections efficaces relatives des différentes voies de capture ainsi que les sections efficaces différentielles qui leurs sont associées. La technique MOTRIMS utilisée ici possède l'avantage de pouvoir préparer facilement la cible atomique. Dans un premier temps, les cibles de rubidium 87 ont été produites dans leur état fondamental ($5^2S_{1/2}$) et dans un état excité ($5^2P_{3/2}$). Dans une seconde partie de ce travail, la cible a été orientée afin de contraindre la voie d'entrée de la collision et de tester encore plus sévèrement les calculs théoriques. Un dispositif d'orientation ainsi que des outils permettant de caractériser cet état orienté de la cible ont été développés.

Lors de cette thèse, nous avons optimisé le dispositif expérimental et refait les simulations nécessaires pour déterminer les conditions idéales permettant d'améliorer la résolution. Ce premier objectif a été un succès, nous avons pu observer les fines structures oscillantes attendues pour certaines distributions en angle de diffusion. Les résultats ont été comparés aux résultats issus des calculs théoriques. On peut noter un excellent accord général pour les sections efficaces relatives ainsi que pour les sections efficaces différentielles associées. Les résultats expérimentaux montrent également une meilleure résolution, sur les observables reconstruites à partir de l'impulsion des ions de recul, que les précédentes expériences menées au LPC CAEN [56] et à KSU [66]. De même, les résultats obtenus pour les collisions sur cible orientée présentent un excellent accord théorie/expérience. Ceci nous permet de valider la méthode théorique employée. Les résultats de ces calculs ont alors été utilisés pour discuter de la validité de modèles plus simples. Ces modèles sont le *velocity matching* et les *propensity rules*, développés spécifiquement pour les collisions sur cibles polarisées à des vitesses de projectile comparables à la vitesse de l'électron actif. Ces deux modèles ne sont pas adaptés aux basses vitesses de projectiles utilisées lors de nos expériences. En revanche, pour une énergie du projectile plus élevée, les calculs théoriques montrent que le modèle du *velocity matching* décrit bien les transitions favorisées ou non.

Perspectives

Comme nous l'avons vu dans l'introduction, la technique MOTRIMS offre des possibilités intéressantes dans différents domaines de la physique. Dans cette partie, nous allons discuter des perspectives du dispositif LPC-MOT à court et moyen terme.

DCSs pour des collisions sur cibles alignées

Lors des expériences avec les cibles orientées, nous avons également pris des données avec des cibles non orientées dans l'état fondamental ou dans l'état excité. Il est donc possible de reconstruire les sections efficaces différentielles de capture pour des cibles orientées ou non. Or, nous savons que ces dernières sont une combinaison linéaire des sections efficaces différentielles de capture sur des cibles dans les deux états orientés ($\text{Rb}(5p_{\pm 1})$) que nous avons produits et de celles sur un état aligné ($\text{Rb}(5p_0)$). La précision des calculs théoriques nous permet de penser que les proportions de chacune de ces transitions sont correctes. Il serait alors possible d'utiliser les proportions fournies par le calcul pour reconstruire les sections efficaces différentielles de capture sur l'état aligné, à partir de celles que nous avons déjà. De cette manière, nous pourrions avoir accès aux sections efficaces différentielles sur cible alignée sans qu'il soit nécessaire de réaliser de nouvelles expériences avec cette cible. Néanmoins, le dispositif dont nous disposons peut nous permettre d'aligner les cibles dans cet état. Pour cela, il faudrait utiliser un faisceau laser de polarisation rectiligne et non circulaire, dans les mêmes conditions expérimentales que celles présentées pour les collisions sur cibles orientées.

Mesure de section efficace absolue

Avec notre dispositif, il est envisageable de réaliser une expérience pour mesurer les sections efficaces absolues de capture. Cette mesure serait l'ultime test des modèles théoriques. Deux méthodes ont d'ailleurs été testées lors de ce travail de thèse.

La difficulté inhérente à ces mesures est liée à la maîtrise des différents paramètres tels que l'intensité et la densité du faisceau projectile incident, la densité de la cible, le temps mort de l'acquisition et finalement le recouvrement entre le faisceau projectile et la cible.

Grâce aux fentes placées en amont de la chambre de collision, ainsi qu'à la cage de Faraday placée à la sortie de celle-ci, l'intensité du faisceau projectile peut être déterminée. En revanche, il est difficile de déterminer précisément le profil du faisceau au sein de la chambre de collision, et encore plus difficile d'évaluer le recouvrement entre le faisceau projectile et le nuage d'atomes froids. Une solution consiste à *scanner* le faisceau projectile avec le nuage en utilisant des bobines de correction en configuration Helmholtz afin de déplacer le nuage autour du centre du piège. Pendant cette procédure, la position et la densité de la cible sont alors mesurées avec notre caméra CCD. Cette expérience a été réalisée mais n'a pas abouti car le nuage ne se déplaçait pas de façon suffisamment continue autour de la zone de collision, ce qui n'a pas permis de déterminer précisément le recouvrement entre la cible et le faisceau projectile.

Une autre méthode a été testée, durant cette thèse. Les résultats obtenus sont beaucoup plus encourageants. C'est cette méthode qui est décrite dans la suite.

Principe de la mesure

L'expression de la section efficace absolue mesurée expérimentalement est donnée par :

$$\sigma_{abs} = \frac{(N_{IR} - N_{bdf})}{\varepsilon I_{PJ} \rho_{cible} L} \quad (4.5)$$

où N_{IR} est le nombre d'ions de recul détectés, N_{bdf} est une estimation du nombre d'événements de bruit de fond, ε est l'efficacité de détection globale, I_{PJ} l'intensité du faisceau projectile, ρ_{cible} la densité de la cible et finalement L le diamètre intérieur des électrodes du spectromètre.

Méthode expérimentale

Densité de la cible. Le rubidium, contenu dans une ampoule, est chauffé à une température de l'ordre de 150° afin d'augmenter la pression dans la chambre de collision et donc le taux de collisions par seconde (c'est maintenant l'ensemble du gaz de Rb présent dans l'enceinte qui fait office de cible). Un des faisceaux laser du MOT polarisé circulairement est envoyé au travers de la chambre afin de servir de sonde de pression. Connaissant le profil et l'intensité du faisceau laser, on peut déterminer la densité de la cible au sein de la chambre de collision en mesurant la fluorescence des atomes de Rb. La méthode utilisée est la même que celle décrite dans le chapitre 2 afin de mesurer la densité du nuage piégé. La densité de la cible mesurée est environ de 8.10^8 atomes/cm³.

Le faisceau projectile. L'intensité et la dimension du faisceau projectile sont mesurées avant et après la chambre de collision, respectivement par les fentes et la cage de Faraday. Nous avons utilisé un faisceau projectile le plus parallèle possible en appliquant aux lentilles électrostatiques de la ligne des tensions adaptées.

Acquisitions. Maintenant que la cible et le faisceau projectile sont caractérisés, il suffit de compter le taux d'ions de recul détectés jusqu'à avoir une statistique suffisante. Durant cette période d'acquisition, on s'assure que l'intensité du faisceau projectile ne varie pas. Pour collecter les ions de recul produits, le spectromètre est polarisé de façon à générer un champ électrique homogène et suffisamment intense. Les tensions appliquées permettent d'accélérer les ions de recul à une énergie de l'ordre de 300 eV. Pour estimer le bruit de fond, il suffit de faire une nouvelle acquisition en inversant la tension d'extraction afin d'empêcher les ions de reculs d'atteindre le détecteur.

Résultats préliminaires et discussion.

Pour des énergies de projectile de 2 et 5 keV, les sections efficaces absolues de capture obtenues sont de $(8,03 \pm 1,18).10^{-15}$ cm² et $(5,55 \pm 0,71).10^{-15}$ cm² alors que les sections efficaces fournies par le calcul théoriques sont de $2,40.10^{-15}$ cm² et $3,29.10^{-15}$ cm². Les résultats expérimentaux et théoriques sont clairement en désaccord. Cet écart peut provenir d'une erreur faite sur la mesure d'intensité du faisceau projectile. Le spectromètre étant fortement polarisé, il est possible que le faisceau projectile soit dévié et que tous les ions incidents ne soient pas collectés sur la cage de Faraday. Cet effet est d'autant plus vrai à 2 keV qu'à 5 keV, ce qui pourrait également expliquer que la section efficace absolue trouvée à 2 keV est supérieure à celle trouvée à 5 keV. Idéalement, il faudrait modifier le dispositif expérimental afin de pouvoir insérer une cage de Faraday dans la zone de collision, c'est-à-dire au centre du spectromètre.

Mise en évidence et caractérisation d'états *trilobites*

L'une des perspectives du LPC-MOT est la production et la mise en évidence de nouveaux états liés appelés *trilobites*. Cet état est composé de deux atomes identiques, dont l'un est dans son état fondamental et le second dans un état de Rydberg avec un moment angulaire $l > 2$. Ces états moléculaires sont prédits théoriquement [85]. Ce sont des états faiblement liés pour lesquels la distance inter-nucléaire est très grande ($\sim 1200 a_0$ où a_0 est l'unité atomique de longueur). L'appellation *trilobite* vient de la forme de la distribution de probabilité de présence de l'électron porté sur l'état de Rydberg qui a l'apparence de ces fossiles (voir figure 4.31). Outre la très grande distance inter-nucléaire qui sépare les deux centres, ces molécules auraient la particularité de présenter un moment dipolaire électrique très élevé, ce qui est inhabituel pour des molécules homo-nucléaires. Si l'on prend l'exemple de trilobites de Rb, la distance inter-nucléaire prévue est de 1232 u.a. et le moment dipolaire électrique équivalent à celui d'une molécule de RbCl. Des molécules proches de celles-ci ont déjà été mises en évidence expérimentalement mais pour un moment angulaire de l'état de Rydberg peuplé nul [86]. Ces dernières présentent une symétrie sphérique pour la distribution de probabilité de présence de l'électron et un moment dipolaire nul.

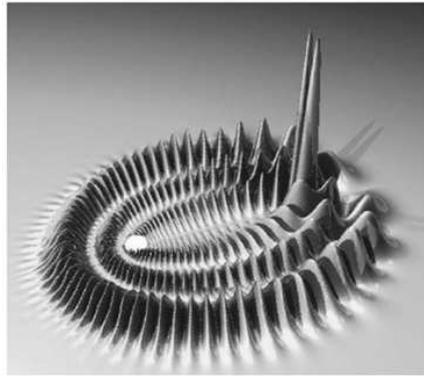
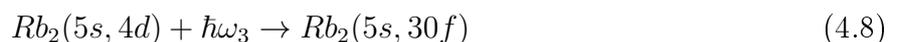
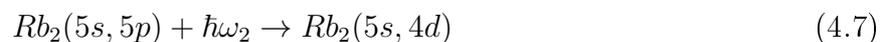


FIGURE 4.31: Représentation de la distribution de probabilité de présence de l'électron sur l'état de Rydberg pour une molécule trilobite.

Production

Si ces molécules existent (avec des durées de vie permettant leur observation), il serait possible de les produire par photo-association. Une expérience a déjà montré la faisabilité de produire l'état 30f du Rb par absorption successive de trois photons. D'autre part, il est possible de produire des molécules de $Rb_2(5s,5p)$ par photo-association. Les états trilobites doivent alors pouvoir être formés en respectant le schéma suivant :



où les valeurs ω_i , avec $i = 1, 2, 3$, sont proches des pulsations lasers permettant d'effectuer les transitions $\text{Rb}(5s) \rightarrow \text{Rb}(5p)$, $\text{Rb}(5p) \rightarrow \text{Rb}(4d)$, et $\text{Rb}(4d) \rightarrow \text{Rb}(30f)$. Les faibles énergies de liaison attendues pour ces molécules nécessitent que les atomes aient une faible énergie cinétique pour leur permettre de se lier. C'est la raison pour laquelle il est nécessaire d'utiliser un MOT pour les produire.

Détection

La technique idéale pour détecter et caractériser ces molécules serait de les faire entrer en collision avec des ions multi-chargés. Si cet ion capture au moins deux électrons, la probabilité que ces électrons soient celui sur l'état de Rydberg et celui dans l'état fondamental du second centre est relativement importante, car ce sont les deux électrons les plus faciles à capturer. Les deux centres, à une distance inter-nucléaire caractéristique d'un trilobite, se repousseraient alors en ayant chacun une impulsion égale en norme et opposée en sens. En utilisant un spectromètre d'impulsion d'ions de recul il serait alors possible de mesurer ces impulsions et de déterminer la distance inter-nucléaire signant la présence de ce nouvel état lié.

Le dispositif LPC-MOT est un candidat idéal pour cette expérience car il est dédié au piégeage d'atomes de rubidium et comporte déjà le dispositif de spectroscopie d'impulsion d'ion de recul nécessaire. Il faudrait coupler notre dispositif à la ligne de production d'ions multi-chargés ARIBE pour permettre ces collisions. Si cet état est observé, il serait également possible avec un dispositif de polarisation d'orienter cette molécule pour en mesurer le moment dipolaire électrique.

La technique MOTRIMS pour tester le Modèle Standard.

Introduction.

Comme nous l'avons déjà évoqué, le LPC-CAEN souhaiterait développer un dispositif de type MOTRIMS afin de réaliser des expériences de corrélation $\beta-\nu$ visant à mettre en évidence des courants exotiques dans la décroissance β d'atomes radioactifs.

La théorie V-A qui décrit l'interaction faible prédit que seuls les courants Vecteur et Axial-Vecteur jouent un rôle lors de transitions β nucléaires. Cette contrainte a pour conséquence de fixer la forme de la distribution en énergie de recul du noyau fils. Le paramètre de corrélation angulaire, $a_{\beta\nu}$, prend alors des valeurs bien précises.

Mesures La dynamique de ce processus est une dynamique à trois corps dont les participants sont l'ion de recul, la particule β et le neutrino (figure 4.32). Le neutrino est très difficile à détecter à cause de son mode d'interaction, seul l'ion de recul et le β sont détectables. Les expériences de corrélation visent à détecter en coïncidence ces deux particules et à mesurer l'impulsion de l'ion de recul.

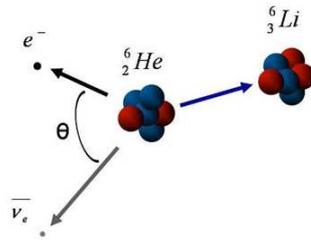


FIGURE 4.32: Schéma d'une décroissance β . Exemple de la décroissance de l' ${}^6\text{He}$.

Intérêt d'un MOT. Ce type d'expérience dite de *précision* nécessite une haute résolution ainsi qu'un contrôle parfait de toutes les sources de bruit de fond existantes. La technique MOTRIMS permettrait dans ce cas de mesurer l'impulsion des ions de recul issus d'une décroissance avec une grande précision mais également d'obtenir un rapport *signal/bruit* élevé en bénéficiant d'un angle solide de détection des ions de recul de 4π .

Bibliographie

- [1] R. C. Isler. An overview of charge-exchange spectroscopy as a plasma diagnostic. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 36(2) :171, 1994.
- [2] T. E. Cravens. X-ray emission from comets. *Science*, 296(5570) :1042–1045, 2002.
- [3] L. H. Uehara, H. Toburen, and S. Nikjoo. Development of a monte carlo track structure code for low-energy protons in water. *International Journal of Radiation Biology*, 77(2) : 139–154, 2001.
- [4] L.H. Uehara, Shuzo, S. Nikjoo, and Hooshang. Monte carlo track structure code for low-energy alpha-particles in water. *The Journal of Physical Chemistry B*, 106(42) :11051–11063, 2002.
- [5] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, 269(5221) :198–201, 1995.
- [6] H. Marion, F. Pereira Dos Santos, M. Abgrall, S. Zhang, Y. Sortais, S. Bize, I. Maksimovic, D. Calonico, J. Grünert, C. Mandache, P. Lemonde, G. Santarelli, Ph. Laurent, A. Clairon, and C. Salomon. Search for variations of fundamental constants using atomic fountain clocks. *Phys. Rev. Lett.*, 90 :150801, Apr 2003.
- [7] H. Klinger, A. Muller, and E. Salzborn. Electron capture processes of multiply charged argon ions in argon at energies from 10 to 90 kev. *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics*, 8(2) :230, 1975.
- [8] C. L. Cocke, R. DuBois, T. J. Gray, E. Justiniano, and C. Can. Coincidence measurements of electron capture and ionization in low-energy $\text{Ar}^{q+} + (\text{He}, \text{Ne}, \text{Ar}, \text{Xe})$ collisions. *Phys. Rev. Lett.*, 46 :1671–1674, Jun 1981.
- [9] A. Müller, W. Groh, and E. Salzborn. Statistical interpretation of transfer ionization in slow collisions of multiply charged ions with atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 51 :107–109, Jul 1983.
- [10] L. Liljeby, G. Astner, A. Bárány, H. Cederquist, H. Danared, S. Huldt, P. Hvelplund, A. Johnson, H. Knudsen, and K-G. Rensfelt. Absolute cross sections for multielectron processes in slow $\text{Ar}^{q+} + \text{Ne}, \text{Ar}, \text{Kr}$ collisions. *Physica Scripta*, 33(4) :310, 1986.
- [11] S. Ohtani, Y. Kaneko, M. Kimura, N. Kobayashi, T. Iwai, A. Matsumoto, K. Okuno, S. Takagi, H. Tawara, and S. Tsurubuchi. Observation of electron capture into selective state by fully stripped ions from He atom. *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics*, 15(15) :L533, 1982.
- [12] H. Cederquist, C. Biedermann, N. Selberg, and P. Hvelplund. Measurements of translational energy gain for one- and two-electron transfer in slow $\text{Ar}^{q+} - \text{He}$ ($q = 15-18$) collisions. *Phys. Rev. A*, 51 :2169–2178, Mar 1995.

- [13] D. Doweck, J. C. Houver, J. Pommier, C. Richter, T. Royer, N. Andersen, and B. Palsdottir. Strong effects of initial orbital alignment observed for electron capture in keV $H^+ - Na(3p)$ collisions. *Phys. Rev. Lett.*, 64 :1713–1716, Apr 1990.
- [14] A. Bordenave-Montesquieu, P. Benoit-Cattin, A. Gleizes, A. I. Marrakchi, S. Dousson, and D. Hitz. Autoionisation of $N^{5+}(nl'n'l')$ with $n=2,3,4$ and $n' \geq n$ measured by electron spectrometry in collisions of N^{7+} with He and H_2 , at 4.9 keV amu^{-1} . *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics*, 17(5) :L127, 1984.
- [15] D. Dijkkamp, A. Brazuk, A. G. Drentje, F. J. de Heer, and H. Winter. Single-electron capture into $C^{3+}(n,l)$ subshells in $C^{4+} - Li$ collisions (20-80 keV). *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics*, 17(21) :4371, 1984.
- [16] P. Boduch, M. Chantepie, D. Hennecart, X. Husson, H. Kucal, D. Lecler, and I. Lesteven-Vaisse. Photon emission spectroscopy of single and double electron capture in $Ar^{8+} - He$ or H_2 collisions. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 22(13) :L377, 1989.
- [17] J. Ullrich and H. Schmidt-Böcking. Time-of-flight spectrometer for the determination of microradian projectile scattering angles in atomic collisions. *Physics Letters A*, 125(4) :193 – 196, 1987.
- [18] W. Wu, K. L. Wong, C. L. Cocke, J. P. Giese, and E. C. Montenegro. Recoil longitudinal momentum and Q -value measurements in electron-capture processes of fast multiply charged ions colliding with He. *Phys. Rev. A*, 51 :3718–3725, May 1995.
- [19] V. Mergel, R. Dörner, J. Ullrich, O. Jagutzki, S. Lencinas, S. Nüttgens, L. Spielberger, M. Unverzagt, C. L. Cocke, R. E. Olson, M. Schulz, U. Buck, E. Zanger, W. Theisinger, M. Isser, S. Geis, and H. Schmidt-Böcking. State selective scattering angle dependent capture cross sections measured by cold target recoil ion momentum spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 74 :2200–2203, Mar 1995.
- [20] S. Duponchel. PhD thesis, Université de Caen Basse-Normandie, 1997.
- [21] A. Cassimi, S. Duponchel, X. Flechard, P. Jardin, P. Sortais, D. Hennecart, and R. E. Olson. State-selective electron capture in low velocity multiply charged ion, helium collisions. *Phys. Rev. Lett.*, 76 :3679–3682, May 1996.
- [22] X. Flechard, S. Duponchel, L. Adoui, A. Cassimi, P. Roncin, and D. Hennecart. State-selective double-electron capture in low-velocity collisions studied by recoil-ion momentum spectroscopy. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 30(16) :3697, 1997.
- [23] E. L. Raab, M. Prentiss, A. Cable, S. Chu, and D. E. Pritchard. Trapping of neutral sodium atoms with radiation pressure. *Phys. Rev. Lett.*, 59 :2631–2634, Dec 1987.
- [24] M. Harvey and A. J. Murray. Cold atom trap with zero residual magnetic field : The ac magneto-optical trap. *Phys. Rev. Lett.*, 101 :173201, Oct 2008.
- [25] D. Fischer, D. Globig, J. Goullon, M. Grieser, R. Hubele, V. L. B. de Jesus, A. Kelkar, A. LaForge, H. Lindenblatt, D. Misra, B. Najjari, K. Schneider, M. Schulz, M. Sell, and X. Wang. Ion-lithium collision dynamics studied with a laser-cooled in-ring target. *Phys. Rev. Lett.*, 109 :113202, Sep 2012.
- [26] L.-B. Wang, P. Mueller, K. Bailey, G. W. F. Drake, J. P. Greene, D. Henderson, R. J. Holt, R. V. F. Janssens, C. L. Jiang, Z.-T. Lu, T. P. O'Connor, R. C. Pardo, K. E. Rehm,

- J. P. Schiffer, and X. D. Tang. Laser spectroscopic determination of the ${}^6\text{He}$ nuclear charge radius. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :142501, Sep 2004.
- [27] P. Mueller, I. A. Sulai, A. C. C. Villari, J. A. Alcántara-Núñez, R. Alves-Condé, K. Bailey, G. W. F. Drake, M. Dubois, C. Eléon, G. Gaubert, R. J. Holt, R. V. F. Janssens, N. Lecesne, Z.-T. Lu, T. P. O'Connor, M.-G. Saint-Laurent, J.-C. Thomas, and L.-B. Wang. Nuclear charge radius of ${}^8\text{He}$. *Phys. Rev. Lett.*, 99 :252501, Dec 2007.
- [28] J.A. Behr. Neutral atom traps of radioactives. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 204(0) :526 – 531, 2003.
- [29] N. D. Scielzo, S. J. Freedman, B. K. Fujikawa, and P. A. Vetter. Measurement of the β - ν correlation using magneto-optically trapped ${}^{21}\text{Na}$. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :102501, Aug 2004.
- [30] N. Bohr, J. Lindhard, and K. Dan. *Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, 28, 1954.
- [31] H. Ryufuku, K. Sasaki, and T. Watanabe. Oscillatory behavior of charge transfer cross sections as a function of the charge of projectiles in low-energy collisions. *Phys. Rev. A*, 21 :745–750, Mar 1980.
- [32] H. Knudsen, H. K. Haugen, and P. Hvelplund. Single-electron-capture cross section for medium- and high-velocity, highly charged ions colliding with atoms. *Phys. Rev. A*, 23 : 597–610, Feb 1981.
- [33] A. Niehaus. A classical model for multiple-electron capture in slow collisions of highly charged ions with atoms. *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics*, 19(18) : 2925, 1986.
- [34] L. D. Landau. *Phys. Z. Sow.*, 1 :46, 1932.
- [35] C. Zener. Non-adiabatic crossing of energy levels. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 137(833) :696–702, 1932.
- [36] R. Abrines and I. C. Percival. Classical theory of charge transfer and ionization of hydrogen atoms by protons. *Proceedings of the Physical Society*, 88(4) :861, 1966.
- [37] A. Salop and R. E. Olson. Electron removal from atomic hydrogen by collisions with fully stripped carbon. *Phys. Rev. A*, 16 :1811–1816, Nov 1977.
- [38] A. Salop. The distribution of excitation resulting from electron capture in stripped-ion-hydrogen-atom collisions. *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics*, 12(6) : 919, 1979.
- [39] R. E. Olson. n, l distributions in $A^{q+} + \text{H}$ electron-capture collisions. *Phys. Rev. A*, 24 : 1726–1733, Oct 1981.
- [40] C. O. Reinhold and C. A. Falcón. Classical ionization and charge-transfer cross sections for $\text{H}^+ + \text{he}$ and $\text{H}^+ + \text{Li}^+$ collisions with consideration of model interactions. *Phys. Rev. A*, 33 :3859–3866, Jun 1986.
- [41] D. Hennecart and J. Pascale. Classical approach to $\text{H}_2^+ - \text{H}(1s)$ collisions. *Phys. Rev. A*, 71 :012710, Jan 2005.
- [42] B. H. Brandsen and M. R. C. McDowell. *Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom Collisions*. Clarendon, Oxford, 1992.
- [43] <http://www.nist.gov/index.html>.
- [44] B. Pons. Monocentric close-coupling expansion to provide ejected electron distributions for ionization in atomic collisions. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :4569–4572, May 2000.

- [45] S. Magnier, P. Millie, O. Dulieu, and F. Masnou-Seeuws. Potential curves for the ground and excited states of the Na_2 molecule up to the $(3s+5p)$ dissociation limit : Results of two different effective potential calculations. *The Journal of Chemical Physics*, 98(9) : 7113–7125, 1993.
- [46] <http://cdsweb.u-strasbg.fr/topbase/topbase.html>.
- [47] T. G. Lee, H. Nguyen, X. Flechard, B. D. DePaola, and C. D. Lin. Differential charge-transfer cross sections for Na^+ with Rb collisions at low energies. *Phys. Rev. A*, 66 :042701, 2002.
- [48] M. Aymar, S. Azizi, and O. Dulieu. Model-potential calculations for ground and excited σ states of Rb_2^+ , Cs_2^+ and RbCs^+ ions. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 36(24) :4799, 2003.
- [49] C. Harel and A. Salin. Application of oedm orbitals to many-electron systems : He^{2+} - He collisions. *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics*, 13(4) :785, 1980.
- [50] C. Ghanmi, H. Bouzouita, N. Mabrouk, and H. Berriche. Ab initio study of NaRb^+ : Potential energy curves, spectroscopic constants and atomic polarizabilities. *Journal of Molecular Structure : THEOCHEM*, 808(1–3) :1 – 7, 2007.
- [51] P. Durand and J.-C. Barthelat. A theoretical method to determine atomic pseudopotentials for electronic structure calculations of molecules and solids. *Theoretical Chemistry Accounts : Theory, Computation, and Modeling (Theoretica Chimica Acta)*, 38 :283–302, 1975.
- [52] B.H. Bransden and R.C. McDowell. *Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom Collisions*. Oxford Science Publications. Oxford University Press, USA, 1992. ISBN 9780198520207. LCCN lc91036597.
- [53] L. F. Errea, C. Harel, H. Jouin, L. Mendez, B. Pons, and A. Riera. Common translation factor method. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 27(16) : 3603, 1994.
- [54] C. Harel and H. Jouin. Electron capture by slow multicharged ions : core effect on final 1 distributions. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 21(5) :859, 1988.
- [55] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, New York, 1965.
- [56] J. Bliciek. *Couplage entre un piège magnéto-optique et un spectromètre d'impulsion d'ions de recul; applications aux collisions ions-atomes*. PhD thesis, Université de Caen Basse-Normandie, 2009.
- [57] M. Machholm, E. Lewartowski, and C. Courbin. Alignment and orientation for charge exchange in Li^+ - $\text{Na}(3s, 3p)$ collisions : I. differential and total cross sections. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 27(19) :4681, 1994.
- [58] J. Ullrich, R. Dörner, V. Mergel, O. Jagutzki, L. Spielberger, and H. Schmidt-Böcking. *Comments At. Mol. Phys.*, 30, 1994.
- [59] R. Dörner, V. Mergel, O. Jagutzki, L. Spielberger, J. Ullrich, R. Moshhammer, and H. Schmidt-Böcking. Cold target recoil ion momentum spectroscopy : a 'momentum microscope' to view atomic collision dynamics. *Phys. Rep.*, 330 :95–192, jun 2000.

- [60] M. van der Poel, C. V. Nielsen, M.-A. Gearba, and N. Andersen. Fraunhofer diffraction of atomic matter waves : Electron transfer studies with a laser cooled target. *Phys. Rev. Lett.*, 87 :123201, Aug 2001.
- [61] J. W. Turkstra, R. Hoekstra, S. Knoop, D. Meyer, R. Morgenstern, and R. E. Olson. Recoil momentum spectroscopy of highly charged ion collisions on magneto-optically trapped Na. *Phys. Rev. Lett.*, 87 :123202, Aug 2001.
- [62] X. Flechard, H. Nguyen, E. Wells, I. Ben-Itzhak, and B. D. DePaola. Kinematically complete charge exchange experiment in the $\text{Cs}^+ + \text{Rb}$ collision system using a mot target. *Phys. Rev. Lett.*, 87 :123203, Aug 2001.
- [63] P. Jardin. PhD thesis, Université de Caen Basse-Normandie, 1995.
- [64] S. Wolf and H. Helm. Ion-recoil energy measurement in photoionization of laser-cooled rubidium. *Phys. Rev. A*, 56 :R4385–R4388, Dec 1997.
- [65] H. J. Metcalf and P. van der Straten. *Laser cooling and trapping*. Springer, 1999.
- [66] H. Nguyen, X. Flechard, R. Brédy, H. A. Camp, and B. D. DePaola. Recoil ion momentum spectroscopy using magneto-optically trapped atoms. *Review of Scientific Instruments*, 75 (8) :2638–2647, 2004.
- [67] M. H. Shah, H. A. Camp, M. L. Trachy, X. Fléchar, M. A. Gearba, H. Nguyen, R. Brédy, S. R. Lundeen, and B. D. DePaola. Relative charge transfer cross section from $\text{Rb}(4d)$. *Phys. Rev. A*, 72 :024701, Aug 2005.
- [68] M. H. Shah, H. A. Camp, M. L. Trachy, G. Veshapidze, M. A. Gearba, and B. D. DePaola. Model-independent measurement of the excited fraction in a magneto-optical trap. *Phys. Rev. A*, 75 :053418, May 2007.
- [69] A. Leredde, A. Cassimi, X. Fléchar, D. Hennecart, H. Jouin, and B. Pons. Atomic-matter-wave diffraction evidenced in low-energy $\text{Na}^+ + \text{Rb}$ charge-exchange collisions. *Phys. Rev. A*, 85 :032710, Mar 2012.
- [70] H. J. Lewandowski, D. M. Harber, D. L. Whitaker, and E. A. Cornell. Simplified system for creating a bose–einstein condensate. *Journal of Low Temperature Physics*, 132 :309–367, 2003.
- [71] E. Liénard, M. Herbane, G. Ban, G. Darius, P. Delahaye, D. Durand, X. Fléchar, M. Labalme, F. Mauger, A. Mery, O. Naviliat-Cuncic, and D. Rodríguez. Performance of a micro-channel plates position sensitive detector. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 551(2–3) :375 – 386, 2005.
- [72] J. Blicke, X. Flechard, A. Cassimi, H. Gilles, S. Girard, and D. Hennecart. A new magneto-optical trap-target recoil ion momentum spectroscopy apparatus for ion-atom collisions and trapped atom studies. *Review of Scientific Instruments*, 79(10) :103102, 2008.
- [73] E. C. G. Stueckelberg. *Helvetica Physica Acta*, 5 :369–375, 1932.
- [74] K. B. MacAdam, J. C. Day, J. C. Aguilar, D. M. Homan, A. D. MacKellar, and M. J. Cavagnero. Transient molecular-ion formation in rydberg-electron capture. *Phys. Rev. Lett.*, 75 :1723–1726, Aug 1995.
- [75] R. K. Janev, J. Pop-Jordanov, and E. A. Solov’ev. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 30(10) :L353, 1997.

- [76] X. Flechard, H. Nguyen, R. Bredy, S. R. Lundeen, M. Stauffer, H. A. Camp, C. W. Fehrenbach, and B. D. DePaola. State selective charge transfer cross sections for Na^+ with excited rubidium : A unique diagnostic of the population dynamics of a magneto-optical trap. *Phys. Rev. Lett.*, 91 :243005, Dec 2003.
- [77] V. G. Hasan, S. Knoop, R. Morgenstern, and R. Hoekstra. State selective capture by highly charged Xe ions. *Journal of Physics : Conference Series*, 58(1) :199, 2007.
- [78] G. A. Kohring, A. E. Wetmore, and R. E. Olson. Ion scattering from state-selected rydberg atoms. *Phys. Rev. A*, 28 :2526–2528, Oct 1983.
- [79] S. E. Nielsen, J. P. Hansen, and A. Dubois. Propensity rules for orientation in singly-charged ion-atom collisions. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 23(15) :2595–2612, 1990.
- [80] T. Royer, D. Doweck, J. C. Houver, J. Pommier, and N. Andersen. Collision spectroscopy with aligned and oriented atoms. *Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters*, 10 :45–57, 1988.
- [81] J. C. Houver, D. Doweck, C. Richter, and N. Andersen. Strong right-left asymmetry observed in charge transfer from circular atomic states near the matching velocity. *Phys. Rev. Lett.*, 68 :162–165, Jan 1992.
- [82] D. Doweck, J. C. Houver, I. Reiser, J. Salgado, A. Svensson, J. W. Thomsen, N. Andersen, S. E. Nielsen, and A. Dubois. Left-right scattering asymmetries for electron transfer from oriented and tilted aligned $\text{Na}(3p)$ states to $\text{H}(n=2,3)$. *Phys. Rev. A*, 54 :970–973, Jul 1996.
- [83] N. Andersen and S. E. Nielsen. *Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters*, 5 :309–319, 1987.
- [84] E. B. B. Campbell, I. V. Hertel, and S. E. Nielsen. Electron translation factors in orienting charge transfer collisions. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 24(17) :3825, 1991.
- [85] C. H. Greene, A. S. Dickinson, and H. R. Sadeghpour. Creation of polar and nonpolar ultra-long-range rydberg molecules. *Phys. Rev. Lett.*, 85 :2458–2461, Sep 2000.
- [86] V. Bendkowsky, B. Butscher, J. Nipper, J. P. Shaffer, R. Löw, and T. Pfau. Observation of ultralong-range rydberg molecules. *Nature*, 458 :1005, 2009.

Collisions ion-atome sur cible préparée par laser : Étude à haute résolution du processus de simple capture

Nous avons étudié le processus de simple capture électronique à basse énergie pour le système $\text{Na}^+ + {}^{87}\text{Rb}(5s,5p)$ à l'aide d'un piège magnéto-optique et d'un spectromètre d'impulsion d'ion de recul. La mesure complète de l'impulsion des ions de recul permet de mesurer les sections efficaces relatives ainsi que les distributions associées en angle de diffusion. Grâce à la très bonne résolution du dispositif, des structures oscillantes, telles que les figures de diffraction attendues pour certaines transitions, ont pu être observées. Nous avons également réalisé des calculs semi-classiques basés sur la méthode MOCC auxquels sont confrontés les résultats expérimentaux. Un très bon accord a été obtenu entre résultats expérimentaux et calculs théoriques.

Afin de pousser le test des calculs théoriques encore plus loin, nous avons par la suite préparé les cibles dans des états orientés. C'est la première fois que l'étude de l'échange de charge sur cible orientée est réalisée avec un dispositif permettant d'avoir une aussi bonne résolution. L'asymétrie *droite-gauche* attendue dans les distributions en angle de diffusion du projectile a été observée et l'accord entre les calculs théoriques et les résultats expérimentaux est très satisfaisant. La fiabilité des calculs permet alors de discuter de la validité de modèles plus simples.

Mots clés : Atomes froids, Refroidissement laser, Spectroscopie à haute résolution, Échange de charge, Interactions ion-atome, Polarisation.

Ion-atom collisions with laser-prepared target : High resolution study of single charge exchange process

Single charge transfer in low-energy $\text{Na}^+ + {}^{87}\text{Rb}(5s,5p)$ collisions is investigated using magneto-optically trapped Rb atoms and high-resolution recoil-ion momentum spectroscopy. The three-dimensional reconstruction of the recoil-ion momentum provides accurate relative cross-sections for the active channels and the projectile scattering angle distributions. Thanks to the high experimental resolution, scattering structures such as diffractionlike oscillations in angular distributions are clearly observed. The measurements are compared with molecular close-coupling calculations and an excellent agreement is found.

To go further in the test of the theory, the target is prepared in an oriented state. It is the first time that such collision experiments with oriented target is performed with such a high resolution. The *right-left* asymmetry expected for the scattering angle distribution is evidenced. The agreement between MOCC calculations and experiments is very good. Simple models developed for collisions with oriented target are also discussed.

Keywords : Cold atoms, Laser cooling, High resolution spectroscopy, Charge exchange, Ion-atom collision, Polarization.

Discipline : Milieux dilués et optique fondamentale

Laboratoire de Physique Corpusculaire – UMR 6534
ENSICAEN – 6, boulevard Maréchal Juin 14050 Caen Cedex – France