École doctorale Sciences Physiques et de l'Ingénieur

THÈSE DE DOCTORAT

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'Université de Bordeaux

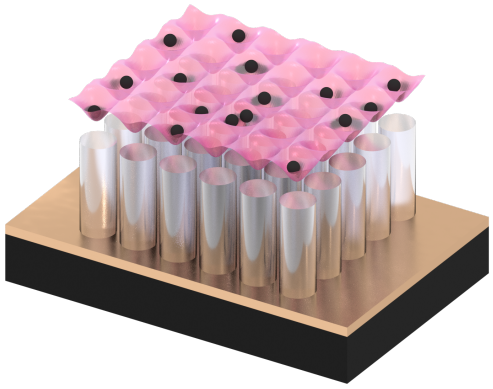
Spécialité doctorale "Lasers, Matière et Nanosciences"

présentée et soutenue publiquement par

Maxime BELLOUVET

le 30 novembre 2018

Condensation de Bose-Einstein et simulation d'une méthode de piégeage d'atomes froids dans des potentiels sublongueur d'onde en champ proche d'une surface nanostructurée



Jury

M. Philippe BOUYER,	LP2N, Université de Bordeaux	Directeur de thèse
M. Daniel BLOCH,	LPL, Université Paris 13	Président
M. Mauro ANTEZZA,	L2C, Université de Montpellier	Rapporteur
M. Franck PEREIRA DOS SANTOS,	SYRTE, Université Paris 6	Rapporteur
M. Darrick CHANG,	ICFO, Technical University of Catalonia	Examinateur
M. Simon BERNON,	LP2N, Université de Bordeaux	Membre invité

Institut d'Optique d'Aquitaine
Laboratoire Photonique, Numérique et Nanosciences
UMR5298, 33400 Talence, France

Remerciements

Cette thèse s'est réalisée avec l'aide et le soutien de certaines personnes que je tiens à remercier ici.

Tout d'abord, je remercie Philippe Bouyer, directeur du LP2N, de m'avoir permis d'effectuer cette thèse au sein du laboratoire. J'exprime ma gratitude aux membres du jury de thèse pour avoir accepté de s'intéresser à ces résultats : M. Franck Pereira dos Santos et M. Mauro Antezza en tant que rapporteurs ; M. Daniel Bloch et M. Darrick Chang en tant qu'examinateurs.

Un grand merci à Simon Bernon pour avoir encadré ces travaux pendant trois années. Les résultats présentés dans ce manuscrit ne seraient pas ce qu'ils sont sans ta vision du projet et ta capacité à rebondir et trouver de nouvelles solutions, notamment pour contourner certains problèmes rencontrés. Je te souhaite plein de succès pour la suite dans ta vie de chercheur.

La partie simulations numériques de cette thèse nous a amené à collaborer avec différentes personnes expertes sur le sujet. Ainsi je remercie grandement Philippe Lalanne pour les discussions sur la partie optique des calculs, ainsi que les personnes du groupe "lumière dans des nanostructures complexes" pour les différents échanges que nous avons pu avoir : Kevin V, Kévin C., Louis et Alexandre. Mes remerciements vont également à Romain Pacanowski pour son aide sur l'optimisation de certains calculs des forces du vide, un bien complexe problème numérique...

Je dirige également mes remerciements aux membres du groupe d'atomes froids que j'ai pu côtoyer dans un bon esprit pendant ces 3 années : Grégoire, Martin, Laure, Grigor, Gabriel, Brynle, Devang, Andrea, Simon et Hodei. En particulier je remercie Hugo, premier doctorant de AUFRONS, pour son accueil sur l'expérience lors de mes premiers stages. Je remercie également Jinyi pour les interactions que nous avons pu avoir. Enfin je souhaite une bonne continuation à Romain qui vient de commencer sa thèse au sein de ce projet, après un an en tant que pré-doctorant. Tu as très vite su te débrouiller seul et faire tourner cette expérience, complexe comme toute manip' d'atomes froids qui se respecte, mais également particulièrement capricieuse ; j'espère que celle-ci sera donc plus clémente avec toi, mais je ne me fais pas de soucis pour toi. Enfin je remercie les autres doctorants et post-doctorants que j'ai pu croiser pendant ces trois années. Merci en particulier à Noémie pour ces quelques moments de lâcher prise.

Si cette thèse s'est déroulée dans de bonnes conditions au sein de ce laboratoire, c'est également grâce au travail de l'équipe administrative, ainsi je remercie Stéphanie et Fabien pour leur efficacité et leur bonne humeur. Je tiens à remercier l'équipe technique du laboratoire, en particulier Jordan pour son aide afin d'assurer le bon fonctionnement et déroulement des travaux pratiques à l'IOGS. Travaux pratiques que j'ai eu la chance d'encadrer, ainsi que des travaux dirigés, pendant ces trois années. Je réalise que c'est une opportunité rare, et je remercie par conséquent Jean Augereau et Denis Boiron de m'avoir fait confiance pour assurer cette tâche.

Nous arrivons maintenant aux remerciements adressés aux personnes qui m'ont permis de réaliser cette thèse dans les meilleures conditions, notamment en me permettant de décompresser pendant cette longue période de thèse.

Premièrement je pense au trio infernal. Dans l'ordre des rencontres : Caroline. Tu étais en stage (de M2) sur le projet AUFRONS quand j'ai commencé mon stage (de M1) sur cette même expérience, faisant de nous de « simples » collègues. Mais au fur à mesure que le temps passa, nous apprîmes (pour toi, amatrice des lettres !) à nous découvrir pour finalement créer une réelle amitié. Nous avons tous deux pris le chemin AUFRONS, chemin semés d'embuches - mais nous le savions pas encore, évidemment. Partager le même bureau pendant ces années de thèses nous aura certainement permis de tenir malgré les nombreuses galères rencontrées !... Par ailleurs, je te suis extrêmement reconnaissant pour la transmission de tes connaissances sur l'expérience ainsi que ta patience dont tu as fait preuve, car ce ne fût pas évident pour moi avec tous ces acronymes (« Caro, ça c'est un VCO ou un VCA du coup ? »). J'espère voir la boîte à post-it encore longtemps !

Ensuite, il y a William. Nous nous côtoyâmes (toujours pour toi Caro) seulement pendant les déjeuners suivis des pauses cafés, mais cela suffisait à passer des moments, ma foi forts sympathiques. Tu es quelqu'un de très riche intellectuellement et humainement, et c'est toujours un plaisir de discuter avec toi. La preuve est que les pauses café prenaient de plus en plus de temps. Et c'est pendant ces pauses que nous nous sommes décidés à nous lancer dans notre projet (fou ?). J'espère que nous pourrons le concrétiser un jour, et que cette amitié durera encore longtemps.

Enfin, Romain, une rencontre bien trop tardive à mon goût !... Tu es très vite devenu un ami, et j'espère que nous aurons encore beaucoup d'autres soirées à l'avenir (notamment piscine !). Merci à toi d'avoir fait le déplacement pour assister à ma soutenance.

Vous êtes tous les trois devenus de vrais amis pendant cette thèse, et rien que pour ça je ne regrette aucunement cette expérience.

Un autre soutien important est la famille. Un immense merci à mes proches pour leur soutien et leurs encouragements, et en particulier à mes parents, car si j'ai pu suivre ces études c'est avant tout grâce à eux. Par ailleurs, pendant cette thèse je suis notamment devenu tonton de mes trois neveux préférés (actuellement) : Liam, Matisse et Louis ; auxquels je dédie en partie (car il y en aura d'autres, alors pas de jaloux) cette thèse (d'ailleurs il va falloir revoir le surnom de tonton 'Nobel', ce n'est plus d'actualité !...).

Enfin, je n'aurais pas assez de 'merci' envers la personne qui m'a le plus soutenu pendant ces trois ans. Tu été là dans les bons moments comme dans les moins bons, mais tu as toujours su trouver les mots pour me re-motiver et m'encourager. A l'image de cette thèse, tu es unique dans ma vie. Je t'ai aimé, je t'aime et je t'aimerai, mon amour Maïtena.

Table des matières

Table des matières v

Liste des figures ix

Introduction générale 1

I Refroidissement et piégeage d'atomes - Caractérisation d'un condensat de Bose-Einstein 9

Introduction 11

1 Atomes froids dans des réseaux optiques 13
1.1 Condensat de Bose-Einstein . . . 14
1.1.1 Saturation des états excités . . . 14
1.1.2 Limite thermodynamique et température critique . . . 15
1.1.3 Equation de Gross-Pitaevskii . . . 18
1.1.4 Approximation de Thomas-Fermi . . . 19
1.2 Réseau optique . . . 20
1.2.1 Force dipolaire : traitement semi-classique . . . 20
1.2.2 Génération d'un potentiel structuré : réseau optique . . . 22
1.2.3 Théorème de Bloch . . . 24
1.3 Energies dans le régime des liaisons fortes . . . 26
1.3.1 Fonctions de Wannier . . . 26
1.3.2 Hamiltonien de Bose-Hubbard . . . 27
1.3.3 Énergies du réseau . . . 29
1.3.4 Condensat dans un réseau optique . . . 31
1.4 Vers des réseaux sub-longueur d'ondes . . . 32
1.4.1 Energies et dynamique du système . . . 32
1.4.2 Réduction de la période du réseau . . . 35
1.4.3 Vers une nouvelle méthode de piégeage en champ proche . . . 36
1.5 Summary . . . 37

2 Refroidissement d'atomes jusqu'au régime de dégénérescence quantique 43
2.1 Dispositif expérimental . . . 44
2.1.1 Espèce atomique . . . 44
2.1.2 Banc optique à 780 nm . . . 45
2.1.3 Système de détection . . . 47
2.1.4 Limites expérimentales . . . 49
2.2 Etapes de refroidissement expérimentales . . . 51
2.2.1 Piège Magnéto-Optique 2D et 3D . . . 51
2.2.2 MOT comprimé . . . 56
2.2.3 Mélasse optique . . . 57

2.2.4 Refroidissement par évaporation dans un piège magnétique 58
2.2.5 Piège hybride 60
2.2.6 Résumé de la séquence 66
2.3 Condensat de Bose-Einstein : caractérisation expérimentale 68
2.3.1 Augmentation de la densité optique 69
2.3.2 Double structure 69
2.3.3 Estimation de la température du nuage 69
2.3.4 Estimation du temps de vie 72
2.4 Calibration du nombre d'atomes 73
2.4.1 Effets de saturation sur le nuage atomique 74
2.4.2 Loi de Beer-Lambert 74
2.5 Conclusions et perspectives 80
2.6 Summary 81

Conclusion **85**

II Simulations du potentiel de piégeage d'atomes froids en champ proche de surfaces nanostructurées **87**

Introduction **89**

3 Optimisation de la géométrie de la nanostructure et calculs des potentiels optiques **91**
3.1 Méthode de piégeage : point clé 92
3.2 Résonance plasmonique 92
3.2.1 Plasmons de surface 93
3.2.2 Configuration de la surface 99
3.3 Interaction atome-champ : effet Stark dynamique 110
3.3.1 Hamiltoniens 110
3.3.2 Polarisabilité atomique 111
3.3.3 Déplacement énergétique : traitement semi-classique 112
3.4 Déplacements optiques : application à l'atome de ^{87}Rb 115
3.5 Summary 119

4 Interaction entre un atome et une nanostructure induite par les fluctuations quantiques : effet Casimir-Polder **123**
4.1 Des forces de van der Waals à Casimir 124
4.1.1 Interaction atome-atome 124
4.1.2 Interaction atome-corps macroscopique 124
4.1.3 Interaction entre deux corps macroscopiques 125
4.2 Potentiel d'interaction atome-surface : couplage multipolaire 126
4.2.1 Éléments de QED 127
4.2.2 Interaction entre une nanostructure et un atome 129
4.2.3 Techniques d'intégration dans le plan complexe 131
4.2.4 Potentiels énergétiques en terme de polarisabilité atomique 133
4.2.5 Polarisabilité et permittivité en fréquences imaginaires 133
4.2.6 Contribution thermique 134
4.3 Interaction atome-surface 136
4.3.1 Surface plane et stratifiée 136
4.3.2 Surface nanostructurée à une dimension 141
4.4 Conclusion et perspectives 161
4.5 Summary 162

5 Méthode de piégeage et structuration d'un potentiel sublongueur d'onde **167**
5.1 Formalisme de l'atome habillé . . . 168
5.1.1 Notations . . . 168
5.1.2 Atome habillé . . . 169
5.2 Méthode de piégeage . . . 171
5.2.1 Piégeage transversal : barrière de potentiel . . . 171
5.2.2 Piégeage longitudinal : modulation CP . . . 171
5.3 Potentiel de piégeage . . . 172
5.3.1 Équations de Bloch optiques . . . 172
5.3.2 Force de piégeage . . . 174
5.4 Caractérisation du piège longitudinal . . . 176
5.4.1 Notations . . . 176
5.4.2 Influence des paramètres expérimentaux sur la géométrie . . . 177
5.4.3 Fonction d'onde et énergie de l'état fondamental . . . 177
5.4.4 Condition d'adiabaticité . . . 180
5.4.5 Taux de diffusion . . . 180
5.4.6 Chauffage . . . 181
5.4.7 Effet tunnel . . . 181
5.4.8 Effet anti-amortissement . . . 183
5.4.9 Chauffage transitoire . . . 185
5.4.10 Temps de vie du piège . . . 186
5.5 Caractérisation du réseau 1D . . . 188
5.5.1 Création du réseau 1D . . . 189
5.5.2 Temps de vie . . . 189
5.5.3 Contrôle de la géométrie . . . 191
5.6 Synthèse des résultats et conclusions . . . 192
5.7 Summary . . . 193

Conclusion **197**

Conclusion générale **199**

A Structure du ^{87}Rb et du ^{40}K **I**
A.1 Schéma de la structure atomique du ^{87}Rb . . . I
A.2 Schéma de la structure atomique du ^{40}K . . . II

B Polarisabilité atomique **III**
B.1 Définition . . . III
B.2 Éléments dipolaires . . . V

C Effet tunnel dans l'approximation Wentzel-Kramers-Brillouin **VII**
C.1 Approximation WKB . . . VII
C.1.1 Région classique : $z_i < z < z_j$ . . . VII
C.1.2 Région non-classique : $z_f < z < z_i$ . . . VIII
C.2 Détermination des relation de connexion entre les amplitudes . . . VIII
C.2.1 Position z_i . . . IX
C.2.2 Position z_f . . . XI

D Propagateurs et Lagrangiens **XIII**
D.1 Définition . . . XIII
D.2 Cas d'une particule libre . . . XV
D.3 Lagrangien d'un atome évoluant dans l'état fondamental . . . XVI

Liste des figures

1.1 Fraction condensée *vs.* T/T_c. 17
1.2 Densités de colonne thermique et condensée d'un BEC évaluées en $y = 0$. 17
1.3 Densité atomique dans l'approximation de Thomas-Fermi. 20
1.5 Réseaux optiques. 24
1.6 Bandes d'énergie dans un réseau optique en fonction du quasi-moment et de la profondeur du réseau. 25
1.7 Fonctions de Wannier $w_j^{(0)}(x)$ pour différentes profondeurs de réseaux. 26
1.8 Approximation des sites du réseau par des potentiels harmoniques. 27
1.9 Energies au sein d'un réseau optique. 29
1.10 Energies tunnel et d'interaction en fonction de la profondeur du réseau optique. 30
1.11 Processus de super-échange. 33
1.12 Energies dans un réseau optique en fonction de la période. 35
1.13 Méthode de piégeage sublongueur d'onde. 37

2.1 Structure hyperfine des niveaux $5S_{1/2}$ et $5P_{3/2}$ du ^{87}Rb. 44
2.2 Schéma du banc optique à 780 nm 46
2.3 Schéma du dispositif d'imagerie par absorption. 49
2.4 Calibration du grandissement du système d'imagerie par temps de vol. 50
2.5 Modifications apportées à l'expérience. 51
2.6 Vues de l'enceinte à vide. 52
2.7 Schéma du dispositif expérimental du MOT 2D. 52
2.8 Schéma du MOT 3D et photographie des bobines de champs magnétiques. . . 53
2.9 Temps de chargement et temps de vie du MOT 3D. 54
2.10 Calibration de la fréquence du faisceau d'imagerie. 55
2.11 Optimisation du MOT 3D. 56
2.12 Optimisation du MOT comprimé. 57
2.13 Photographie des bobines de compensation et optimisation de la mélasse optique. 58
2.14 Principe et séquence expérimentale du refroidissement par évaporation. 59
2.15 Temps de vie du piège magnétique. 60
2.16 Spectroscopie des états $F = 1$ et $F = 2$ du niveau $5S_{1/2}$. 62
2.17 Évolution du nombre d'atomes en fonction de la fréquence des impulsions micro-ondes et de la tension des bobines selon (Oz). 63
2.18 Schéma du montage expérimental pour le piège dipolaire. 64
2.19 Oscillations de la taille et de la position du nuage d'atomes froids. 65
2.20 Evolution de la fréquence de piège dans la direction verticale en fonction de la puissance optique. 66
2.21 Résumé de la séquence expérimentale de refroidissement. 67
2.22 Limites du système d'imagerie sur le condensat. 68
2.23 Évolution de la densité optique du gaz ultrafroid en fonction de la puissance en fin d'évaporation optique. 69
2.24 Observation d'une double structure dans le profil du condensat. 70

2.25 Estimation des températures mesurées et critiques. 71
2.26 Estimation du temps de vie du BEC. 73
2.27 Montage expérimental pour la calibration du nombre d'atomes. 77
2.28 Calibration de la puissance aux atomes en fonction de la tension sur la photodiode. 78
2.29 Comparaison des nombres de coups expérimental et théorique correspondant à l'intensité de saturation. 79
2.30 Évolution de la profondeur optique en fonction de l'intensité incidente pour différentes valeurs de α^*. 80

3.1 Schéma récapitulatif des transitions utilisées pour la méthode de piégeage. . . 92
3.2 Schéma de l'interface métal/diélectrique. 93
3.3 Relation de dispersion d'un SP. 95
3.4 Longueurs caractéristiques des plasmons de surface. 96
3.5 Résonance plasmonique avec une configuration en prisme de Kretschmann-Raether. 97
3.6 Réflectivité en configuration Kretschmann-Raether en fonction de l'angle incident et l'épaisseur du métal. 98
3.7 Temps de vie des atomes en champ proche d'une surface métallique. 100
3.8 Modification du taux de diffusion en champ proche d'une nanostructure métallique. 101
3.9 Exemple de procédé expérimental pour la fabrication d'une surface stratifiée et structurée. 102
3.10 Influence du métal sur le profil évanescent de l'intensité du champ électrique. 103
3.11 Optimisation géométrique de la surface plane stratifiée. 105
3.12 Optimisation géométrique de la couche de métal de la surface nanostructurée à 1D. 106
3.13 Optimisation géométrique de la surface stratifiée et structurée à 1D. 107
3.14 Étude de convergence sur le nombre d'harmoniques et tracé du profil spatial de l'intensité. 108
3.15 Configuration optique du piégeage à 1D : profils unidimensionnels des intensités lasers à 1529 nm. 109
3.16 Déplacements des états hyperfins de l'état $5P_{3/2}$ du ^{87}Rb en fonction de l'intensité d'une onde plane à 1529.34 nm. 117
3.17 Approximations des déplacements des états hyperfins de l'état $5P_{3/2}$ en champs faibles et en champs forts à 1529.34 nm. 118
3.18 Déplacements des niveaux hyperfins de l'état $5S_{1/2}$ en fonction de l'intensité d'une onde à 780.24 nm. 119

4.1 Potentiels d'interaction dans différentes configurations et méthodes de calcul associées. 126
4.2 Définition des contours pour l'intégration sur les fréquences imaginaires. . . . 132
4.3 Polarisabilité atomique du ^{87}Rb et permittivité diélectrique des matériaux de la surface aux fréquences imaginaires. 134
4.4 Évolution des potentiels CP à température nulle et à T=300 K en fonction de la distance atome-surface. 136
4.5 Schéma de la configuration utilisée pour le calcul de l'interaction CP entre l'atome de ^{87}Rb et de la structure plane stratifiée. 136
4.6 Comparaison du potentiel exact caractérisant l'interaction entre un atome de ^{87}Rb et un milieu semi-infini en or avec les asymptotes dans les régimes non-retardé et retardé. 140
4.7 Déplacement énergétique de l'état fondamental $5S_{1/2}$ du ^{87}Rb dû à l'interaction CP entre l'atome et la surface plane stratifiée. 141

4.8 Potentiel d'interaction entre un atome ^{87}Rb dans l'état excité et la structure stratifiée multi-couches. . . . 142
4.9 Configuration des interactions dans l'approximation PWS. . . . 143
4.10 Étude de convergence de l'intégrale sur les variables géométriques I_s^{nres} résolue numériquement en fonction de l'intégration sur r_m. . . . 145
4.11 Erreur relative commise dans l'approximation PWS en fonction du nombre de points et des bornes pour l'intégration sur z_m. . . . 145
4.12 Interaction entre un atome de ^{87}Rb et une couche de diélectrique : rapport des potentiels calculés dans l'approximation PWS et de manière exacte. . . . 146
4.13 Convergence du potentiel CP d'un atome excité dans l'approximation PWS. . . . 147
4.14 Configuration du réseau à une dimension pour le calcul des coefficients de réflexion en amplitude. . . . 148
4.15 Comparaison de nos résultats avec la littérature sur le potentiel d'interaction entre un atome de ^{87}Rb et un réseau 1D en or. . . . 153
4.16 Influence de la couche périodique en or sur l'interaction entre un atome dans l'état fondamental et la structure 1D. . . . 156
4.17 Potentiel d'interaction entre un atome de ^{87}Rb dans l'état fondamental et la surface structurée à 1D en fonction de la position atomique. . . . 157
4.18 Partie non-résonante du potentiel d'interaction entre un atome de ^{87}Rb dans l'état excité et la surface structurée à 1D en fonction de la position atomique. . . . 158
4.19 Étude de la convergence de la partie résonante propagative de l'interaction entre le réseau 1D et l'atome dans l'état 5P. . . . 159
4.20 Étude de la convergence de la partie résonante évanescente de l'interaction entre le réseau 1D et l'atome dans l'état 5P. . . . 159
4.21 Comparaison des calculs de la partie non-résonante caractérisant l'interaction entre un atome dans l'état 5P et la structure 1D dans l'approximation PWS. . . . 161

5.1 États énergétiques dans le formalisme de l'atome habillé. . . . 169
5.2 Évolution des énergies propres dans le formalisme de l'état habillé en fonction de la fréquence de Rabi. . . . 170
5.3 Schéma de principe du piégegage transversal. . . . 171
5.4 Schéma de principe du piégeage longitudinal à une dimension. . . . 172
5.5 Tracés des potentiels d'interaction entre l'atome et la structure en fonction de la distance z. . . . 174
5.6 Influence des paramètres expérimentaux sur la géométrie du piégeage transversal. . . . 177
5.7 Profil du potentiel U_s utilisé pour déterminer la fonction d'onde et l'énergie de l'état fondamental. . . . 178
5.8 Convergence des calculs dans la méthode ITP et tracé de la fonction d'onde de l'état fondamental. . . . 180
5.9 Profil du potentiel de piégeage pour le calcul de l'effet tunnel dans l'approximation WKB. . . . 182
5.10 Évolution de la hauteur de barrière U_b et de la profondeur du piège U_0 en fonction de la puissance du laser à 1529 nm. . . . 187
5.11 Évolution des temps caractéristiques du piège. . . . 188
5.12 Potentiel de piégeage structuré à une dimension. . . . 189
5.13 Approximation d'un puits de potentiel par un oscillateur harmonique pour le calcul par effet tunnel dans la direction (Ox). . . . 190
5.14 Influence des paramètres lasers sur la géométrie du réseau 1D. . . . 191
5.15 Géométrie du piège 1D : balayage des intensités lasers. . . . 192

A.1 Structure atomique fine et hyperfine du ^{87}Rb. . . . I
A.2 Structure atomique fine et hyperfine du ^{40}K. . . . II

C.1 Correspondance des fonctions d'ondes au point z_i dans l'approximation WKB. IX

Introduction générale

Il y a un siècle naissait la théorie de la mécanique quantique. En terme de prédictions, cette théorie est l'une des plus abouties. Pourtant les postulats qui la façonnent sont loin de nous être familiers, nous humains. En effet, cette théorie, qui décrit le monde microscopique, permet notamment à un objet d'être à deux endroits à la fois (superposition) ou bien à deux objets à deux positions différentes d'être intrinsèquement liés (intrication). Malgré ces résultats déconcertants au premier abord, l'Homme a réussi à appréhender les lois de cette théorie quantique, permettant ainsi des avancées considérables dans le domaine de la recherche et de l'industrie. Depuis plusieurs décennies, de nombreux efforts sont réalisés afin d'exploiter les lois de la mécanique quantique dans les technologies de demain. De nos jours, il est courant d'étudier et de manipuler des systèmes quantiques dans les laboratoires tels que des photons uniques [O'Brien et al., 2009], des atomes [Wieman et al., 1999], des ions [Wineland et al., 1998], des électrons individuels [Morton and Lovett, 2011], des spins nucléaires [Pla et al., 2013], mais également des circuits supraconducteurs [Houck et al., 2012] ou des systèmes nanomécaniques [Poot and van der Zant, 2012]. Cela est notamment possible grâce aux avancées spectaculaires des dernières décennies. En effet, le développement des lasers a permis de créer des sources optiques tandis que les avancées dans les sciences des matériaux et le domaine des semi-conducteurs ont permis de réaliser des détecteurs dotés d'une grande précision.

Ces progrès expérimentaux ont ainsi permis à différentes technologies de voir le jour [O'Brien et al., 2009] dans divers domaines tels que :

- la **communication** qui fait appel par exemple à la transmission des photons dans les fibres optiques ou des électrons au sein d'un courant. Le photon, constituant élémentaire de la lumière, est un bon candidat dans ce domaine en raison de sa vitesse de propagation (célérité c) et de son faible bruit. Récupérer des informations signifie "effectuer une mesure physique", or l'un des principes de la mécanique quantique dit que toute mesure effectuée modifie le système initial. Ainsi, une application découlant de ce principe concerne la communication de données secrètes sur de longues distances, la cryptographie [Sergienko, 2006]. En effet, si l'information a été interceptée lors de sa transmission alors celle-ci est modifiée, révélant la présence d'une entité externe.

- le traitement de l'**information quantique** qui repose sur la manipulation de bits quantiques (*qubits* pour *quantum bits* en anglais) et qui permettrait de réaliser des ordinateurs quantiques [Nielsen and Chuang, 2000]. De manière analogue au *bit* dans les ordinateurs classiques, le *qubit* est un état qui contient de l'information. Cependant contrairement au *bit* qui peut soit prendre l'état 0 ou l'état 1, le *qubit* peut non seulement décrire un de ces états mais également être dans une superposition de ces deux états. Il est possible d'encoder de l'information en créant un *qubit* avec un photon [O'Brien, 2007] mais également des *qubits* supraconducteurs qui reposent sur la robustesse de la supraconductivité et de l'effet Josephson [Devoret and Schoelkopf, 2013].

- les **mesures de précision** qui sont la base de toute technologie. Un exemple d'application reposant sur la mécanique quantique est l'interférométrie atomique, que l'on rencontre par exemple en cosmologie (détection d'ondes gravitationnelles) ou pour la navigation inertielle (gyroscope). En mécanique quantique il est bien connu que la limite fondamentale est imposée par le principe d'incertitude de Heisenberg. Cependant, les mesures physiques sont souvent limitées par les incertitudes statistiques des appareils de mesures. Dans ce cas ci, il est possible de réduire les erreurs statistiques en effectuant n mesures indépendantes afin de moyenner les résultats. On obtient alors une erreur sur la mesure qui évolue en $1/\sqrt{n}$ (distribution statistique de Poisson), c'est la limite quantique standard (SQL pour *Standard Quantum Limit* en anglais) ou bruit quantique (*shot noise* en anglais). Il existe cependant des moyens (*squeezing* et intrication d'états) pour dépasser ces limites afin de se rapprocher de la limite fondamentale en $1/n$ définie par le principe de Heisenberg, on parle alors de métrologie quantique [Giovannetti et al., 2011].

- la **simulation quantique** qui permet de simuler d'autres systèmes quantiques de manière analogue. L'idée proposée par Richard Feynman en 1982 fût simple [Feynman and P., 1982] :

"[...] nature isn't classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical, and by golly it's a wonderful problem, because it doesn't look so easy.".

Ainsi, même si cela peut paraître évident avec du recul, R. Feynman proposa de simuler un système quantique par un autre système quantique contrôlable, on parle alors de simulateur quantique [Buluta and Nori, 2009]. De nos jours, les ordinateurs classiques que nous utilisons sont limités pour certains calculs. Prenons par exemple le cas d'un système à N particules de spins 1/2 : on doit alors stocker en mémoire 2^N valeurs et l'évolution temporelle correspond à prendre l'exponentielle d'une matrice de taille $2^N \times 2^N$. Avec un temps de simulation $t_{sim} \propto e^N$, il est inutile de préciser que les calculs deviennent impossibles à réaliser, même avec les ordinateurs actuels les plus puissants. Un avantage dans la réalisation de simulation quantique est donc la capacité à traiter des systèmes contenant plus d'une centaine de particules. De plus, ces simulateurs permettraient de tester de nouveaux modèles physiques, impossibles à réaliser jusqu'à maintenant. Ils peuvent par exemple être utilisés : en physique de la matière condensée pour tester des problèmes de magnétisme quantique ou de supraconductivité à haute température, en piégeant des atomes/ions dans des potentiels structurés analogues à des électrons/atomes au sein d'un cristal [Bloch et al., 2012] ; en cosmologie pour tester certains modèles tels que l'expansion de l'univers en étudiant la propagation d'ondes sonores dans un condensat de Bose-Einstein [Fischer and Schützhold, 2004] ou le rayonnement de Hawking en analysant la rotation d'ions dans un anneau magnétique pour simuler des trous noirs [Horstmann et al., 2010] ; ou bien encore en chimie quantique pour simuler les réactions chimiques par exemple, en étudiant le comportement d'électrons dans une boîte quantique (*quantum dot* en anglais) [Smirnov et al., 2007].

Selon l'application, certains systèmes quantiques sont plus adaptés que d'autres [Buluta et al., 2011]. Par exemple la transmission de données tire profit des photons car ils peuvent transporter de l'information sur de longues distances tout en gardant leur cohérence. Cela les rend particulièrement adaptés à la communication [Gisin and Thew, 2007]. Les propriétés de cohérence des spins sont quant à eux intéressantes pour obtenir de longs temps de stockage, et par conséquent servir de mémoire quantique. Ainsi on peut utiliser les spins électroniques au sein de boîte quantique [Loss and DiVincenzo, 1998] ou les spins électroniques associés aux spin nucléaires dans un centre coloré NV (*Nitrogen-Vacancy* en anglais) dans le diamant [Dutt et al., 2007]. Ces systèmes microscopiques (e.g, atomes et spins) sont cependant difficilement contrôlables de manière individuelle et évoluent plus lentement en

raison de leur faible couplage avec les champs extérieurs. Les circuits supraconducteurs présentent quant à eux l'avantage d'être contrôlable individuellement et peuvent s'ajouter les uns aux autres pour créer de plus grands circuits afin de résoudre des calculs plus complexes [You and Nori, 2005]. De plus le fort couplage avec les champs externes permet d'effectuer des opérations rapides. L'inconvénient est qu'ils possèdent des temps de cohérence courts, de par leur couplage avec l'environnement. Il n'y a donc pas encore un système quantique unique capable à la fois de traiter, stocker et transporter de l'information par exemple.

Ainsi, depuis plusieurs décennies, un intérêt est né pour combiner les avantages de ces systèmes en créant un système hybride quantique (SHQ) [Kurizki et al., 2015]. L'idée est de réunir deux systèmes quantiques de manière à posséder des qualités qu'il serait impossible d'atteindre avec un seul. L'élément clé dans la réalisation d'un SHQ est la capacité à faire communiquer les deux systèmes, notés A et B. En mécanique quantique, cette communication se traduit par la nécessité d'un hamiltonien de couplage $\hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{AB}}$. Divers systèmes ont ainsi été imaginés, en couplant par exemple des ions [Tian et al., 2004] et des atomes [Verdú et al., 2009] avec des circuits supraconducteurs, ou bien directement des ions avec des atomes [Zipkes et al., 2010]. Des SHQs ont également été proposés en couplant des cavités avec des atomes ou des ions [Schoelkopf and Girvin, 2008]. Il existe aussi de l'électrodynamique quantique (QED pour *Quantum ElectroDynamics* en anglais) en cavité à l'état solide où des photons microondes permettent de coupler deux *qubits* supraconducteurs [Majer et al., 2007]. Des approches de couplage en champ proche d'atomes avec des plasmons de nanoparticules [Gullans et al., 2012], des cristaux photoniques [Goban et al., 2014] ou des fibres optiques [Vetsch et al., 2010] ont également été proposées.

Parmi les systèmes quantiques, les atomes froids se distinguent par leur fort découplage de l'environnement, permettant ainsi un contrôle précis de leurs propriétés intrinsèques. Les atomes froids, qui se présentent sous la forme d'un gaz, rendent le SHQ plus difficile à mettre en œuvre car ils sont souvent interfacés à des systèmes solides. Le défi expérimental est alors de réussir à transporter et piéger les atomes proche de la structure. C'est vers cette direction que le projet **AUFRONS** (pour **A**tomes **U**ltra**F**roids dans des **R**éseaux **O**ptiques **N**ano**S**tructurés) se dirige. Ce projet, auquel ma thèse est dédiée, vise à piéger des atomes dans un potentiel sublongueur d'onde en champ proche d'une surface, l'idée étant de coupler les atomes froids avec la nanostructure pour étudier des interactions qui en résultent (e.g., interactions atome-atome à longue portée médiées par les modes de surface). Comme nous le verrons, cela permettrait également de réaliser un simulateur quantique aux propriétés assez différentes des simulateurs quantiques réalisés en champ lointain (*i.e.*, en faisant interférer des lasers). Il a donc fallu mettre en place une méthode qui permettrait non seulement de transporter les atomes en champ proche d'une structure, mais également de les piéger à de faibles distances. Pour cela nous avons tout d'abord mis en place une séquence de refroidissement pour obtenir un condensat de ^{87}Rb. Puis nous avons effectué des simulations sur le piégeage d'atomes froids dans un potentiel sublongueur d'onde *via* une méthode de piégeage que nous présenterons.

Cette thèse se découpe en deux parties : la Partie I, qui englobe les Chapitres 1 et 2, traite du refroidissement d'atomes de ^{87}Rb jusqu'au régime de dégénérescence quantique ; la Partie II, qui contient les Chapitres 3, 4 et 5, est destinée à présenter la méthode de piégeage d'atomes froids en champ proche de nanostructures que nous avons implémentée pendant cette thèse. Chaque partie possède une introduction où sont détaillés les contenus de chaque chapitre ainsi qu'une conclusion.

English version

One century ago, quantum mechanics was born. In terms of predictions, this theory is one of the most successful. However the postulates that build it are truly not familiar to us, humans. Indeed, this theory ,which describes nature at the scale of particles, allows one object to be located at two positions at the same time (superposition) or two objects located at different positions to be intrinsically connected (entanglement). Despite these troubling results, human beings have managed to handle these quantum laws by transposing them into research and industry to achieve considerable progress. For decades, numerous efforts have been made to exploit quantum effects into future technologies. Nowadays, quantum systems are commonly studied and manipulated in laboratories such as single photons [O'Brien et al., 2009], atoms [Wieman et al., 1999], ions [Wineland et al., 1998], individual electrons [Morton and Lovett, 2011], nuclear spins [Pla et al., 2013], but also superconducting circuits [Houck et al., 2012] or nanomechanical systems [Poot and van der Zant, 2012]. This is possible due to tremendous achievements during the last decades. Indeed, the advancements of laser technology led to light sources while progress in semiconductors and material sciences brought detectors with great precision.

All these experimental breakthroughs led to various technologies [O'Brien et al., 2009] in different fields such as :

- **communication** that uses transmission of photons in optical fibers or electrons within a current. Photons, which are elementary components of light, are excellent candidates in this field because of their propagation speed (celerity c) and their low noise. Collecting data means "perform a physical measurement", yet one of the core principles of quantum mechanics states that the act of observing destroys the initial state. Thus, one direct application is communication of secret data over long distances, called cryptography [Sergienko, 2006]. Indeed, if one intercepts the propagating information during its transmission, then his or her presence will be revealed by the resulting modification of the state carrying the information.

- **quantum information** processing that are based ont quantum bits (qubits) manipulation and could be used to realize quantum computers [Nielsen and Chuang, 2000]. Similarly to bits in classical computers, qubits are states carrying information. However, in contrast to a bit, which is associated to only two states (0 or 1), the qubit can take these two values but also be into a superposition of both states. One can encode information by creating a qubit with a photon [O'Brien, 2007] but with superconducting qubits too, which use robustness of superconductivity and Josephson effect [Devoret and Schoelkopf, 2013].

- **precise measurements** which are basics of every technology. One of the applications based on quantum mechanics is atom interferometry, which can be used in cosmology (gravitationnal waves detection) or inertial navigation (gyroscope). It is well known in quantum theory that the fundamental limit in measurements is imposed by Heisenberg's uncertainty principle. However, physical measurements are often limited by statistical errors of measuring devices. In this case, these errors can be reduced by performing n independent measurements in order to average the results. The corresponding error evolves as $1/\sqrt{n}$ (Poisson distribution), known as the standard quantum limit or shot noise. Alternatives such as squeezing or state entanglement can be exploited to overcome this limit so that the error converges on the fundamental limit $1/n$ imposed by Heisenberg's principle, this is quantum metrology [Giovannetti et al., 2011].

- **quantum simulation** which allows one to simulate other quantum systems in an analog way. The idea initially suggested by Richard Feynman in 1982 was simple [Feynman and P., 1982] :

"[...] nature isn't classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical, and by golly it's a wonderful problem, because it doesn't look so easy.".

Even if it may sound evident with hindsight, R. Feynman proposed to simulate a quantum system by another controllable quantum system, this is the definition of a quantum simulator [Buluta and Nori, 2009]. Nowadays, classical computers are not powerful enough for some calculations. Let's consider N particles with spin 1/2 : it requires to save 2^N values in memory while the corresponding evolution time is given by the exponential matrix of size $2^N \times 2^N$. With a simulation time $t_{sim} \propto e^N$, it is needless to say that calculations become impossible to compute, even with the most powerful existing machines. A clear advantage by using quantum simulation is the ability to deal with systems containing more than a hundred of particles. Moreover, simulators would allow one to test new physical models, still impossible to compute. For example, they could be used : in condensed matter physics to study quantum magnetism problems or high-temperature superconductivity, by trapping atoms/ions in structured potentials to mimic electrons/atoms in crystals [Bloch et al., 2012] ; in cosmology to test some models such as the universe expansion by studying propagation of sound waves in a Bose-Einstein condensate [Fischer and Schützhold, 2004] or Hawking radiation by using rotating ions in a magnetic ring to reproduce black holes' behaviors [Horstmann et al., 2010] ; or in quantum chemistry to simulate chemical reactions for instance, by studying electron dynamics in a quantum dot [Smirnov et al., 2007].

Depending on the application, some quantum systems are more suitable compared to others [Buluta et al., 2011]. For instance, transmission of data takes advantage of photons since they can carry information over long distances with no decoherence. They are well adapted to communication technologies [Gisin and Thew, 2007]. Coherence properties of spins are interesting to obtain long storage times, and consequently useful for quantum memory applications. Thus, one can use electronic spins in quantum dots [Loss and DiVincenzo, 1998] or electronic spins associated to nuclear spins in nitrogen-vacancy color centers in diamond [Dutt et al., 2007]. Yet, these microscopic systems (e.g., atoms and spins) are hardly controllable individually and evolve more slowly because of their weak coupling with external fields. On the other hand, superconducting circuits provide the ability to be individually controllable and scalable to achieve more complex calculations [You and Nori, 2005]. Furthermore, their strong coupling with external fields offer fast operations. One drawback is their short coherence times, because of this external coupling. Consequently there is still not an unique quantum system capable of processing, storing and carrying information at once, for example.

For some decades, an interest has been growing up for combining the advantages of such systems by creating a quantum hybrid system (QHS) [Kurizki et al., 2015]. The idea is to join two quantum systems in order to reach qualities impossible to have with only one. The key element to realize a QHS is the necessity to make both systems A and B communicate. In quantum mechanics, this communication translates into a coupling hamiltonian $\hat{\mathscr{H}}_{AB}$. Various systems have been proposed, by coupling ions [Tian et al., 2004] and atoms [Verdú et al., 2009] with superconducting circuits, or directly ions with atoms [Zipkes et al., 2010]. Other configurations have also been suggested by coupling cavities with atoms or ions [Schoelkopf and Girvin, 2008]. There is also quantum electrodynamics in solid-state cavity where the use of microwave photons allows one to couple two superconducting qubits [Majer et al., 2007]. Other schemes have been proposed such as near-field coupling of atoms

with nanoparticles [Gullans et al., 2012], with photonic crystals [Goban et al., 2014] or optical fibers [Vetsch et al., 2010].

In this family of coupled quantum systems, ultracold atoms distinguish themselves by their strong decoupling from environment which enables an excellent control of their intrinsic properties. The interfacing of cold atoms, which stand in gaseous form, to other quantum systems, which are predominantly solid-state devices, is a challenging task. It requires one to control the transport and trapping of atoms close to their quantum counterparts. This is the direction the **AUFRONS** project (for **U**ltra**C**old**A**toms in **N**ano**S**tructured **O**ptical **L**attices) is pointing. This project, in which my thesis is part of, aims at trapping atoms in subwavelength potentials in the near field of a surface, in order to couple cold atoms with nanostructure and study resulting interactions (e.g., long range atom-atom interactions mediated by surface modes). As we will see, this could lead to quantum simulator whose properties would be quite different to common quantum simulators in far field (*i.e.*, by making lasers interfere). Hence it was necessary to implement a method that would be able to transport atoms in the vicinity of a structure and trap them at short distances. To do so, we first set up a cooling sequence to realize a rubidium condensate. Then we carried out theoretical simulations about trapping cold atoms in a subwavelentgh potential with a new trapping method we will present.

This manuscript splits into two parts : Part I, including Chapters 1 and 2, deals with cooling ^{87}Rb atoms until quantum degeneracy regime ; Part II, including Chapters 3, 4 and 5, presents the trapping method of cold atoms in the near-field of nanostructures that we have implemented during this thesis. Each part also includes an introduction where the content of chapters is detailed as well as a conclusion.

Références

Bloch, I., Dalibard, J., and Nascimbène, S. (2012). Quantum simulations with ultracold quantum gases. *Nature Physics*, 8(4) :267–276. 2, 5

Buluta, I., Ashhab, S., and Nori, F. (2011). Natural and artificial atoms for quantum computation. *Reports on Progress in Physics*, 74(10) :104401. 2, 5

Buluta, I. and Nori, F. (2009). Quantum simulators. *Science (New York, N.Y.)*, 326(5949) :108–11. 2, 5

Devoret, M. H. and Schoelkopf, R. J. (2013). Superconducting circuits for quantum information : an outlook. *Science (New York, N.Y.)*, 339(6124) :1169–74. 1, 4

Dutt, M. V. G., Childress, L., Jiang, L., Togan, E., Maze, J., Jelezko, F., Zibrov, A. S., Hemmer, P. R., and Lukin, M. D. (2007). Quantum Register Based on Individual Electronic and Nuclear Spin Qubits in Diamond. *Science*, 316(5829) :1312–1316. 2, 5

Feynman, R. P. and P., R. (1982). Simulating physics with computers. *International Journal of Theoretical Physics*, 21(6-7) :467–488. 2, 5

Fischer, U. and Schützhold, R. (2004). Quantum simulation of cosmic inflation in two-component Bose-Einstein condensates. *Physical Review A*, 70(6) :063615. 2, 5

Giovannetti, V., Lloyd, S., and Maccone, L. (2011). Advances in quantum metrology. *Nature Photonics 2011*, 5(4) :222. 2, 4

Gisin, N. and Thew, R. (2007). Quantum communication. *Nature Photonics*, 1(3) :165–171. 2, 5

Goban, A., Hung, C.-L., Yu, S.-P., Hood, J., Muniz, J., Lee, J., Martin, M., McClung, A., Choi, K., Chang, D., Painter, O., and Kimble, H. (2014). Atom–light interactions in photonic crystals. *Nature Communications*, 5 :3808. 3, 6

Gullans, M., Tiecke, T. G., Chang, D. E., Feist, J., Thompson, J. D., Cirac, J. I., Zoller, P., and Lukin, M. D. (2012). Nanoplasmonic Lattices for Ultracold Atoms. *Physical Review Letters*, 109(23) :235309. 3, 6

Horstmann, B., Reznik, B., Fagnocchi, S., and Cirac, J. I. (2010). Hawking Radiation from an Acoustic Black Hole on an Ion Ring. *Physical Review Letters*, 104(25) :250403. 2, 5

Houck, A. A., Türeci, H. E., and Koch, J. (2012). On-chip quantum simulation with superconducting circuits. *Nature Physics*, 8(4) :292–299. 1, 4

Kurizki, G., Bertet, P., Kubo, Y., Mølmer, K., Petrosyan, D., Rabl, P., and Schmiedmayer, J. (2015). Quantum technologies with hybrid systems. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 112(13) :3866–73. 3, 5

Loss, D. and DiVincenzo, D. P. (1998). Quantum computation with quantum dots. *Physical Review A*, 57(1) :120–126. 2, 5

Majer, J., Chow, J. M., Gambetta, J. M., Koch, J., Johnson, B. R., Schreier, J. A., Frunzio, L., Schuster, D. I., Houck, A. A., Wallraff, A., Blais, A., Devoret, M. H., Girvin, S. M., and Schoelkopf, R. J. (2007). Coupling superconducting qubits via a cavity bus. *Nature*, 449(7161) :443–447. 3, 5

Morton, J. J. and Lovett, B. W. (2011). Hybrid Solid-State Qubits : The Powerful Role of Electron Spins. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 2(1) :189–212. 1, 4

Nielsen, M. A. and Chuang, I. L. (2000). *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge edition. 1, 4

O'Brien, J. L. (2007). Optical Quantum Computing. *Science*, 318(5856) :1567–1570. 1, 4

O'Brien, J. L., Furusawa, A., and Vučković, J. (2009). Photonic quantum technologies. *Nature Photonics*, 3(12) :687. 1, 4

Pla, J. J., Tan, K. Y., Dehollain, J. P., Lim, W. H., Morton, J. J. L., Zwanenburg, F. A., Jamieson, D. N., Dzurak, A. S., and Morello, A. (2013). High-fidelity readout and control of a nuclear spin qubit in silicon. *Nature 2013 496 :7445*, 496(7445) :334. 1, 4

Poot, M. and van der Zant, H. S. (2012). Mechanical systems in the quantum regime. *Physics Reports*, 511(5) :273–335. 1, 4

Schoelkopf, R. J. and Girvin, S. M. (2008). Wiring up quantum systems. *Nature*, 451(7179) :664–669. 3, 5

Sergienko, A. V. (2006). *Quantum communications and cryptography*. Taylor & Francis, crc press edition. 1, 4

Smirnov, A. Y., Savel'ev, S., Mourokh, L. G., and Nori, F. (2007). Modelling chemical reactions using semiconductor quantum dots. *EPL (Europhysics Letters)*, 80(6) :67008. 2, 5

Tian, L., Rabl, P., Blatt, R., and Zoller, P. (2004). Interfacing Quantum-Optical and Solid-State Qubits. *Physical Review Letters*, 92(24) :247902. 3, 5

Verdú, J., Zoubi, H., Koller, C., Majer, J., Ritsch, H., and Schmiedmayer, J. (2009). Strong Magnetic Coupling of an Ultracold Gas to a Superconducting Waveguide Cavity. *Physical Review Letters*, 103(4) :043603. 3, 5

Vetsch, E., Reitz, D., Sagué, G., Schmidt, R., Dawkins, S. T., and Rauschenbeutel, A. (2010). Optical Interface Created by Laser-Cooled Atoms Trapped in the Evanescent Field Surrounding an Optical Nanofiber. *Physical Review Letters*, 104(20) :203603. 3, 6

Wieman, C. E., Pritchard, D. E., and Wineland, D. J. (1999). Atom cooling, trapping, and quantum manipulation. *Reviews of Modern Physics*, 71(2) :S253–S262. 1, 4

Wineland, D. J., Monroe, C., Meekhof, D. M., King, B. E., Leibfried, D., Itano, W. M., Bergquist, J. C., Berkeland, D., Bollinger, J. J., and Miller, J. (1998). Quantum state manipulation of trapped atomic ions. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 454(1969) :411–429. 1, 4

You, J. Q. and Nori, F. (2005). Superconducting Circuits and Quantum Information. *Physics Today*, 58(11) :42–47. 3, 5

Zipkes, C., Palzer, S., Sias, C., and Köhl, M. (2010). A trapped single ion inside a Bose–Einstein condensate. *Nature*, 464(7287) :388–391. 3, 5

Première partie

Refroidissement et piégeage d'atomes - Caractérisation d'un condensat de Bose-Einstein

Introduction

Les atomes froids piégés dans des réseaux optiques sont d'excellents candidats pour la simulation de problèmes en physique de la matière condensée. En effet, ces systèmes présentent une grande contrôlabilité, e.g., en modulant les interactions atomiques par des résonances de Feshbach optiques ou magnétiques. De plus ils sont bien isolés de l'environnement, ce qui permet d'améliorer la dynamique avec des temps de cohérence de l'ordre de la seconde par exemple, correspondant à la dynamique des électrons dans un solide. Un autre avantage est la capacité de détection individuelle d'atome grâce aux progrès réalisés dans le domaine de l'imagerie superlocalisée.

Dans cette première partie nous nous intéressons au refroidissement et au piégeage d'atomes. Le Chapitre 1 décrit le phénomène de condensation de Bose-Einstein ainsi que les signatures expérimentales qui caractérisent ce régime. Nous présenterons par ailleurs le piégeage d'atomes dans des réseaux optiques et les énergies associées. Nous discuterons les limites rencontrées avec ce système ainsi que les solutions pour y remédier. Nous présenterons ensuite le principe de la méthode que nous avons implémentée pour piéger des atomes dans des potentiels sublongueur d'onde en champ proche d'une nanostructure. Le Chapitre 2 est dédié aux résultats expérimentaux que nous avons obtenus. Nous détaillerons pour cela les différentes étapes qui nous ont permis d'atteindre le régime de dégénérescence quantique dont nous donnerons les signatures expérimentales.

English version

Ultracold atoms trapped in optical lattices are excellent candidates for simulating problems in condensed matter physics. Indeed, they offer a great tunability, e.g., with the use of optical or magnetic Feshbach resonances to tune atomic interactions. Furthermore, they present a strong decoupling from the environment, which allows one to speed up the dynamics with coherence time of 1 s for instance, corresponding to electron dynamics in solids. Another advantage is the ability of detecting a single atom by means of super-resolution imaging techniques.

In this first part, we will deal with cooling and trapping atoms. In Chapter 1, we will describe Bose-Einstein condensation phenomenon along with the experimental signs that characterize this quantum regime. We will also treat about trapping atoms in optical lattices and the resulting energy scale. We will discuss the limits of such a system and some solutions. Finally we will introduce the method we have implemented in order to trap atoms in subwavelength potentials in the near field of a nanostructure. In Chapter 2, we will present the experimental results we obtained. Thereby, we will detail the sequence that led us to the quantum degeneracy regime and we will give a qualitative characterization.

Chapitre 1

Atomes froids dans des réseaux optiques

« [Quantum mechanics] describes nature as absurd from the point of view of common sense. And yet it fully agrees with experiment. So I hope you can accept nature as She is - absurd. »

Richard Feynman

Sommaire

1.1 Condensat de Bose-Einstein 14
1.1.1 Saturation des états excités 14
1.1.2 Limite thermodynamique et température critique 15
1.1.3 Equation de Gross-Pitaevskii 18
1.1.4 Approximation de Thomas-Fermi 19
1.2 Réseau optique 20
1.2.1 Force dipolaire : traitement semi-classique 20
1.2.2 Génération d'un potentiel structuré : réseau optique 22
1.2.3 Théorème de Bloch 24
1.3 Energies dans le régime des liaisons fortes 26
1.3.1 Fonctions de Wannier 26
1.3.2 Hamiltonien de Bose-Hubbard 27
1.3.3 Énergies du réseau 29
1.3.4 Condensat dans un réseau optique 31
1.4 Vers des réseaux sub-longueur d'ondes 32
1.4.1 Energies et dynamique du système 32
1.4.2 Réduction de la période du réseau 35
1.4.3 Vers une nouvelle méthode de piégeage en champ proche 36
1.5 Summary 37

Dans ce chapitre nous expliquerons tout d'abord le phénomène de condensation de Bose-Einstein, mis en lumière par les travaux de Satyendranath Bose et Albert Einstein dans les années 1920 [Bose, 1924; Einstein, 1924]. Un gaz de bosons atteint ce régime de dégénérescence quantique lorsque les particules s'accumulent dans leur état fondamental et forment un objet quantique macroscopique aux propriétés différentes d'un gaz classique (e.g., la cohérence). Les propriétés ondulatoires des particules permettent d'introduire une dimension caractéristique pour l'étendue spatiale de la fonction d'onde atomique définie

par la longueur d'onde thermique de *de Broglie* : $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$, où m est la masse de la particule et T la température du gaz. Pour un gaz de densité atomique n la transition (de phase) vers la condensation a lieu lorsque l'extension spatiale λ_T est de l'ordre de la distance inter-particule $n^{-1/3}$. Dans un premier temps nous montrerons que cette condensation s'explique par l'existence d'une borne maximale pour le nombre d'occupation des particules dans les états excités d'un gaz parfait piégé dans un potentiel harmonique, ne laissant alors pas d'autres choix aux autres atomes que de s'accumuler dans l'état fondamental. Nous introduirons l'équation de Gross-Pitaevskii qui permet de décrire l'évolution d'un gaz dilué dans le cas de faibles interactions inter-atomiques.

Nous étudierons ensuite brièvement la force dipolaire utilisée pour le refroidissement d'atomes et leur piégeage dans des potentiels périodiques de lumière, où nous introduirons la notion de réseau optique. Nous verrons en quoi l'utilisation d'atomes froids dans les réseaux est un bon outil pour la simulation quantique. Pour cela nous définirons les différentes énergies au sein du réseau optique et les conditions à respecter pour y transférer efficacement un condensat de Bose-Einstein.

Enfin nous présenterons comment atteindre de nouveaux régimes d'interaction permettant l'exploration d'une physique encore méconnue, notamment en présentant l'idée générale de notre nouvelle approche de réseau sublongueur d'onde en champ proche de surfaces nanostructurées et des possibilités qu'elle pourrait offrir.

1.1 Condensat de Bose-Einstein

Dans un premier temps nous étudions la condensation d'un gaz sans interactions afin d'introduire certaines notions.

1.1.1 Saturation des états excités

Dans cette partie nous traitons un gaz parfait (sans interactions) dans un piège de dimension finie. Pour cela nous considérons un nuage de température T composé de N atomes de masse m, piégés dans un potentiel harmonique anisotropique de fréquence ω_i dans la direction i ($\equiv x, y, z$) donné par

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} m \left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2 \right). \tag{1.1}$$

Il s'agit ici du problème de l'oscillateur harmonique à 3 dimensions dont les énergies propres sont caractérisées par les nombres quantiques $\mathbf{n} \equiv (n_x, n_y, n_z)$ et valent

$$\varepsilon_{\mathbf{n}} = \hbar \left[\left(n_x + \frac{1}{2} \right) \omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \omega_z \right], \tag{1.2}$$

où nous notons l'énergie fondamentale $\varepsilon_{\mathbf{0}} = 3\hbar(\omega_x + \omega_y + \omega_z)/2$. Nous rappelons que $n_i \in \mathbb{N}$, ainsi la notation de l'indice $\mathbf{0}$ signifie que l'on a $n_x = n_y = n_z = 0$.

La probabilité d'occupation d'un état $\mathbf{n}$ est donnée par la distribution de Bose-Einstein :

$$f_{BE}(\mathbf{n}) = \frac{1}{e^{(\varepsilon_{\mathbf{n}} - \mu)/k_B T} - 1}, \tag{1.3}$$

où nous notons μ le potentiel chimique du gaz, qui, pour donner du sens à cette définition (*i.e.*, $f_{BE} > 0$), vérifie la condition $\mu < \varepsilon_{\mathbf{0}}$. Nous pouvons écrire le nombre total de particules N correspondant à la somme de toutes les probabilités d'occupation (1.3), soit

$$N = \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{e^{(\varepsilon_{\mathbf{n}} - \mu)/k_B T} - 1} = N_0 + N_{exc}, \tag{1.4}$$

avec

$$N_0 = \frac{e^{(\mu - \varepsilon_0)/k_B T}}{1 - e^{(\mu - \varepsilon_0)/k_B T}} \quad \text{et} \quad N_{exc} = \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} \frac{e^{\mu/k_B T}}{e^{\varepsilon_{\mathbf{n}}/k_B T} - e^{\mu/k_B T}}, \tag{1.5}$$

les contributions de l'état fondamental et des états excités, respectivement. En se rappelant que $\mu < \varepsilon_0$, nous en déduisons que $0 < e^{(\mu-\varepsilon_0)/k_B T} < 1$, ce qui fixe une borne maximale pour le nombre d'atomes dans les états excités :

$$N_{exc}^{max} = \sum_{\mathbf{n}\neq\mathbf{0}} \frac{1}{e^{\varepsilon_\mathbf{n}/k_B T} - 1}. \tag{1.6}$$

Ainsi, à une température T fixée, si l'on augmente le nombre total d'atomes dans le piège tel que $N > N_{exc}^{max}$, les états excités vont saturer et $N_0 \simeq N - N_{exc}^{max}$ atomes vont s'accumuler dans l'état fondamental. Cette accumulation macroscopique d'atomes dans le même état décrit le phénomène de condensation du gaz d'atomes piégés. Cet ensemble atomique forme alors une onde de matière cohérente et macroscopique que l'on nomme condensat de Bose-Einstein (BEC). La proportion d'atomes dans l'état fondamental correspond aux particules condensées tandis que les atomes dans les états excités saturés correspondent à la fraction thermique du BEC. Les densités spatiales correspondantes seront tracées dans la section suivante, lors du passage à la limite thermodynamique. Par ailleurs, nous notons que pour un nombre d'atomes N fixé, lorsque l'on réduit la température T la borne maximale du nombre d'atomes dans les états excités N_{exc}^{max} diminue également, et par conséquent la fraction d'atomes condensés devient plus importante.

Dans le paragraphe précédent nous avons considéré un gaz parfait (sans interactions) dans un système de taille finie ($V(x) \to \infty$ quand $x \to \pm\infty$) et nous avons étudié le phénomène de saturation des états excités conduisant à l'accumulation des atomes du gaz dans l'état fondamental. Théoriquement, pour un système de taille finie, la saturation des états excités se produit si l'on a un spectre en énergie discret et si la convergence de (1.6) est vérifiée, ce qui est le cas pour une boîte à 3 dimensions (problème initialement étudié par [Einstein, 1924]) ou un piège harmonique. Expérimentalement, le cas d'un gaz piégé dans un potentiel uniforme (e.g., une boîte) a récemment été réalisé et vérifie cette théorie de saturation des états excités pour un gaz sans interaction [Gaunt et al., 2013]. Pour un piège harmonique, cette saturation s'avère plus compliquée à observer. En effet, le potentiel vu par les atomes thermiques est localement déformé par la densité des atomes condensés plus importante au centre. Les interactions entre les atomes thermiques et condensés entraînent donc une modification de la prédiction pour N_{exc}^{max} [Tammuz et al., 2011]. En outre, les interactions jouent un rôle important dans la condensation et la stabilité du condensat, comme nous le verrons dans la partie 1.1.3.

1.1.2 Limite thermodynamique et température critique

Nous avons traité le cas d'un spectre en énergie discret (gaz parfait dans un piège de taille finie), mais qu'en est-il lorsque l'on passe à la limite thermodynamique ($N \to \infty$, $\omega_i \to 0$, de sorte que la densité centrale $N\bar{\omega}^3$ soit constante, où nous définissons la moyenne géométrique des trois fréquences de l'oscillateur $\bar{\omega} = (\omega_x\omega_y\omega_z)^{1/3}$) ?

Nous étudions toujours un gaz parfait piégé harmoniquement et nous supposons que $\hbar\omega_i << k_B T$. Dans cette limite, nous effectuons le changement suivant : $\sum_{\mathbf{n}\neq\mathbf{0}} \to \int\int\int dn_x dn_y dn_z$, ainsi nous réécrivons (1.6) tel que

$$N_{exc}^{max} = \int\int\int \frac{dn_x dn_y dn_z}{e^{\varepsilon_\mathbf{n}/k_B T} - 1}. \tag{1.7}$$

En posant $\varepsilon_\mathbf{n} = \varepsilon_{n_x} + \varepsilon_{n_y} + \varepsilon_{n_z}$ avec $\varepsilon_{n_i} = n_i\hbar\omega_i$, nous pouvons écrire le nombre d'états $\beta(\varepsilon_\mathbf{n})$ d'énergie $\varepsilon = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$ inférieure à $\varepsilon_\mathbf{n}$:

$$\beta(\varepsilon_\mathbf{n}) = \int\int\int dn_x dn_y dn_z = \frac{1}{\hbar^3\bar{\omega}^3}\int_0^{\varepsilon_\mathbf{n}} d\varepsilon_x \int_0^{\varepsilon_\mathbf{n}-\varepsilon_x} d\varepsilon_y \int_0^{\varepsilon_\mathbf{n}-\varepsilon_x-\varepsilon_y} d\varepsilon_z = \frac{\varepsilon_\mathbf{n}^3}{6\hbar^3\bar{\omega}^3}. \tag{1.8}$$

Nous pouvons alors calculer la densité d'états définie par

$$\rho(\varepsilon_{\mathbf{n}}) = \frac{d\beta}{d\varepsilon_{\mathbf{n}}} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{n}}^2}{2\hbar^3\bar{\omega}^3}. \tag{1.9}$$

Avec ces définitions, nous pouvons réécrire le nombre maximal d'atomes dans les états excités (1.7) :

$$N_{exc}^{max} = \int_0^\infty \frac{\rho(\varepsilon_{\mathbf{n}})d\varepsilon_{\mathbf{n}}}{e^{\varepsilon_{\mathbf{n}}/k_B T}-1} = \frac{1}{2\hbar^3\bar{\omega}^3}\int_0^\infty \frac{\varepsilon_{\mathbf{n}}^2 d\varepsilon_{\mathbf{n}}}{e^{\varepsilon_{\mathbf{n}}/k_B T}-1}. \tag{1.10}$$

Avec le changement de variable suivant : $\xi = \varepsilon_{\mathbf{n}}/k_B T$, nous pouvons exprimer le résultat précédent sous la forme

$$N_{exc}^{max} = \frac{1}{2}\left(\frac{k_B T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3 \int_0^\infty \frac{\xi^2 d\xi}{e^\xi - 1}. \tag{1.11}$$

Pour le calcul de l'intégrale nous utilisons le résultat mathématique suivant [Abramowitz and Stegun, 1970] :

$$\int_0^\infty \frac{\xi^{\alpha-1}d\xi}{e^\xi - 1} = \Gamma(\alpha)\,\varsigma(\alpha), \tag{1.12}$$

avec $\Gamma(\alpha)$ et $\varsigma(\alpha)$ les fonctions gamma et zeta Riemann, respectivement. Dans notre cas à 3 dimensions, nous avons $\alpha = 3$, soit $\Gamma(3) = 2$ et $\varsigma(3) = 1.202$. Au final nous avons l'expression suivante :

$$N_{exc}^{max} = 1.202\left(\frac{k_B T}{\hbar\bar{\omega}}\right)^3. \tag{1.13}$$

Avec cette formule nous déduisons la température critique T_c qui traduit l'entrée dans le régime de condensation, lorsque les états excités sont arrivés à saturation, soit $N = N_{exc}^{max}$. D'après (1.13) elle est donnée par

$$T_c \approx 0.94\frac{\hbar\bar{\omega}}{k_B}N^{1/3}. \tag{1.14}$$

Comme mentionné dans l'introduction, à cette température, la distance inter-particules devient de l'ordre de la longueur d'onde de *de Broglie* : $\lambda_T \sim n^{-1/3}$. Au-dessus de cette température T_c, le nombre d'atomes dans l'état fondamental N_0 n'est plus de l'ordre de N, et l'on sort alors du régime de dégénérescence quantique.

Par ailleurs en notant que $N = N_0 + N_{exc}$ et en utilisant les résultats (1.13) et (1.14), nous trouvons la relation suivante :

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3. \tag{1.15}$$

Ce résultat correspond à la fraction d'atomes condensés, dont l'évolution en fonction de la température du nuage est représentée en Fig.1.1. Nous observons bien une transition pour $T/T_c = 1$. Les atomes vont commencer à s'accumuler dans l'état fondamental si l'on diminue davantage la température.

Enfin, une autre quantité intéressante pour caractériser le nuage est la densité atomique. La densité totale $n(\mathbf{r})$ du nuage peut se décomposer en deux parties : une partie dite condensée liée à la quantité d'atomes dans l'état fondamental que nous notons $n_0(\mathbf{r})$ et une partie thermique liée aux atomes dans les états excités que nous notons $n_T(\mathbf{r})$. En l'absence d'interactions la densité de la partie condensée est simplement donnée par

$$n_0(\mathbf{r}) \;=\; N_0\,|\Phi_0(\mathbf{r})|^2, \tag{1.16}$$

où

$$\Phi_0(\mathbf{r}) = \left(\frac{m\bar{\omega}}{\pi\hbar}\right)^{3/4} e^{-\frac{m}{2\hbar}(\omega_x x^2+\omega_y y^2+\omega_z z^2)} \tag{1.17}$$

est la fonction d'onde de l'état fondamental du potentiel harmonique (1.1). La densité thermique peut se calculer, dans le cadre d'une approximation semi-classique [Dalfovo et al.,

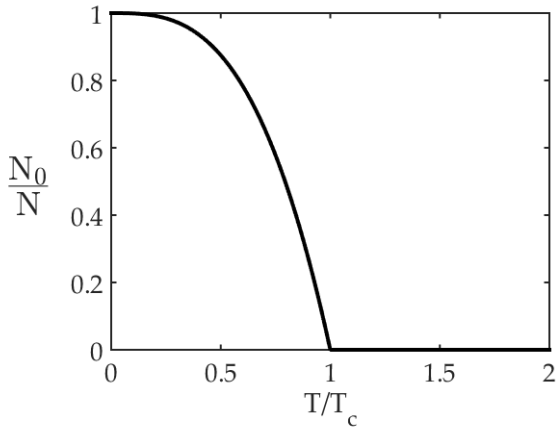


FIGURE 1.1 – **Fraction condensée *vs.* T/T_c.** Fraction d'atomes condensés N_0/N pour un gaz sans interaction en fonction du rapport de la température du nuage T sur la température critique T_c marquant la transition de phase vers la dégénérescence quantique.

1999], en passant d'une somme $\sum_{\mathbf{n}}$ à une intégrale $(2\pi\hbar)^{-3}\int d\mathbf{p}$ dans la relation (1.4). Cela donne

$$n_T(\mathbf{r}) = \lambda_T^{-3} g_{3/2}\left(e^{-V(\mathbf{r})/k_B T}\right), \tag{1.18}$$

où $g_\alpha(z) = \sum_{n=1}^{\infty} z^n/n^\alpha$ est la fonction polylogarithmique.

Les densités colonnes associées aux densités atomiques sont définies par $n_{0,T}(x) = \int dz n_{0,T}(x,0,z)$ et sont tracées en Fig.1.2 pour un piège harmonique isotrope avec $\omega_i = \bar{\omega} = 100$ Hz (où $i = x, y, z$), $N = 5000$ et $T = 0.9T_c$.

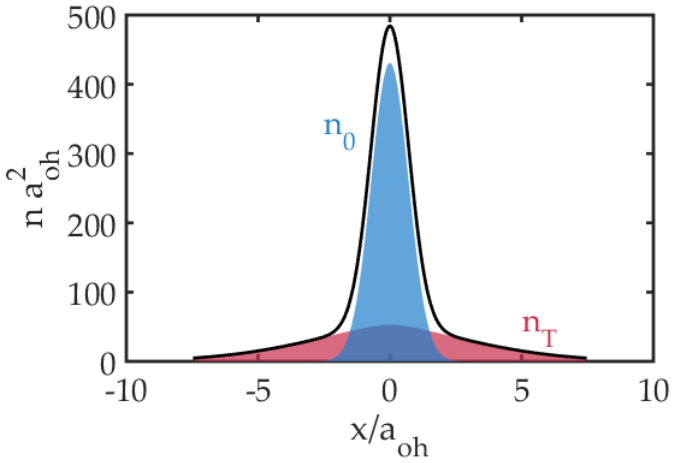


FIGURE 1.2 – **Densités de colonne thermique et condensée d'un BEC évaluées en $y = 0$.** Représentation des densités colonnes thermique $n_T(x)$ (rouge) et condensée $n_0(x)$ (bleu) en fonction de la position. La densité totale (noir) est la somme de ces deux contributions : $n(x) = n_T(x) + n_0(x)$. La position est donnée en unité de $a_{oh} = \sqrt{\hbar/m\bar{\omega}}$, qui définit l'étalement caractéristique de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique. La densité de colonne (définie dans le texte) est exprimée en unité de a_{oh}^{-2}.

Dans cette partie nous avons pu vérifier la convergence de l'intégrale (1.7) lors du passage dans la limite thermodynamique, en raison de la dépendance quadratique en énergie de la densité d'états (1.9). Dans la limite thermodynamique, cela est également vrai pour le cas 2D de l'oscillateur, mais pas à une dimension [Bagnato and Kleppner, 1991]. Dans le cas d'une boîte dont les dimensions tendent vers l'infini, le phénomène de condensation ne peut se produire en théorie qu'à 3D [Dalibard, 2016]. Néanmoins, les effets de taille finie des

systèmes expérimentaux mènent à l'apparition d'une longueur de cohérence supérieure à la taille du système même dans le cas 2D [Chomaz et al., 2015].

1.1.3 Equation de Gross-Pitaevskii

Nous considérons ici un gaz dilué composé de N particules piégées dans un potentiel $V(\hat{\mathbf{r}})$. Nous prenons une énergie d'interaction entre deux particules positionnées à $\hat{\mathbf{r}}_i$ et $\hat{\mathbf{r}}_j$ sous la forme d'une interaction de contact [Pethick and Smith, 2008] :

$$U\left(\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j\right) = g\delta\left(\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j\right), \tag{1.19}$$

où g est la force d'interaction entre les deux particules. Pour un gaz de bosons à faibles interactions, on a $g = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ dans le cas d'interactions à courte portée (onde s), avec la longueur de diffusion a_s. L'utilisation de ce potentiel de contact peut se justifier en comparant les longueurs caractéristiques du système : pour les alcalins, a_s (~ qlqs nm) est généralement inférieure aux distances inter-particules $n^{-1/3}$ (~ 0.1 – 1 µm).

L'évolution de ce gaz est décrite par le hamiltonien suivant :

$$\hat{\mathscr{H}} = \sum_{j=1}^{\infty}\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}_j)\right) + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} U\left(\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j\right). \tag{1.20}$$

Nous avons ici affaire à un problème à N corps dont l'espace de Hilbert est exponentiellement proportionnel au nombre de particules du gaz. Ainsi, pour simplifier les calculs, nous réalisons une approximation en champ moyen : nous considérons la fonction d'onde à N particules $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N)$ comme le produit de N fonctions d'ondes identiques $\Phi(\mathbf{r}_i)$ qui correspondent à l'état d'une particule pour laquelle l'effet des N-1 particules est ainsi traité moyennement. La fonction d'onde est ainsi donnée par

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^{\infty}\Phi(\mathbf{r}_i). \tag{1.21}$$

Avec cette approximation, on se réduit à un problème à une particule, dont l'énergie est donnée par la fonctionnelle $\epsilon(\Phi)$, et qui, d'après le hamiltonien (1.20), permet de réécrire l'énergie totale associée à l'état (1.21) :

$$E(\Phi) = \langle\Psi|\hat{\mathscr{H}}|\Psi\rangle = N\epsilon(\Phi) = N\int\left[\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\Phi|^2 + V(\mathbf{r})|\Phi(\mathbf{r})|^2 + \frac{N-1}{2}g|\Phi(\mathbf{r})|^4\right]d^3r. \tag{1.22}$$

L'idée est de minimiser l'énergie et donc de minimiser cette fonctionnelle $\epsilon(\Phi)$ pour retrouver l'équation d'évolution correspondante [Cohen-Tannoudji, 1998]. Ce calcul permet d'obtenir l'équation de Gross-Pitaevskii pour un gaz dilué [Gross, 1961; Pitaevskii, 1961] :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Phi + V(\mathbf{r})\Phi + Ng|\Phi|^2\Phi = \mu\Phi, \tag{1.23}$$

où nous avons pris $N-1 \approx N$, car $N >> 1$. Cette équation est aussi appelée équation de Schrödinger non-linéaire de par la présence du dernier terme à gauche de l'égalité. La valeur propre est µ, le potentiel chimique du gaz. Il correspond à l'énergie qu'il faut fournir pour ajouter une particule au gaz. Contrairement au cas précédent (approche statistique) où le potentiel chimique était borné à l'énergie fondamentale du système ϵ_0, il peut ici prendre des valeurs supérieures lorsque $T < T_c$, *i.e.*, dans le régime de condensation.

Les termes à gauche de (1.23) correspondent, dans l'ordre, à l'énergie cinétique, l'énergie potentielle et l'énergie d'interaction entre particules. Selon le type d'interactions, les termes vont se compenser pour maintenir la stabilité du condensat. Dans le cas d'interactions attractives ($a_s < 0$), l'énergie cinétique doit à la fois compenser l'énergie de piégeage et l'attraction mutuelle entre particules pour éviter que le nuage ne s'effondre sur lui-même. Dans le

cas opposé où les interactions sont répulsives ($a_s > 0$), alors le potentiel de piégeage doit compenser l'augmentation en taille du nuage atomique due à ces interactions et à l'énergie cinétique. C'est ce dernier cas qui nous intéresse étant donnée la nature de l'espèce atomique considérée dans notre expérience (pour le ^{87}Rb : $a_s \sim 100a_0 > 0$, avec le rayon de Bohr a_0).

Nous avons ici étudié le comportement d'un gaz d'atomes bosoniques dilué à faibles interactions entre particules. Le système à N corps se ramène à l'étude d'un système formé d'une particule effective, dont l'état est une onde macroscopique cohérente décrite par l'équation de Gross-Pitaevskii (1.23). Les calculs menant à ce résultat ont été faits dans la plus simple des approximations prenant en compte les interactions du gaz dilué (approximation de Hartree). En réalité, les fonctions propres de chaque atome $\Phi(\mathbf{r}_i)$ ne sont pas réellement identiques, certaines pouvant présenter des variations spatiales plus rapides en raison des corrélations pour de faibles distances inter-particules, résultant en un nombre d'atomes dans cet état plus petit que le nombre total N. Pour aller plus loin dans le traitement de ces corrélations induites par ces interactions, il faut par exemple utiliser la théorie de Bogoliubov [Bogoliubov, 1947] qui consiste à introduire de faibles fluctuations autour de ce résultat d'ordre 0 [Dalfovo et al., 1999].

1.1.4 Approximation de Thomas-Fermi

Pour de grand nombre d'atomes N, nous pouvons déterminer une solution approchée à l'équation de Gross-Pitaevskii pour l'état fondamental. Nous considérons ici des interactions répulsives entre atomes (ce qui est le cas pour l'espèce atomique que nous cherchons à refroidir, *i.e.*, du ^{87}Rb avec $a_s \sim 100a_0 > 0$). Avec ces hypothèses, la stabilité du condensat résulte d'une compétition entre les interactions répulsives et l'énergie potentielle. Nous pouvons ainsi réaliser l'approximation de Thomas-Fermi en négligeant le terme cinétique de (1.23), ce qui donne

$$\left[\mathrm{V}(\mathbf{r}) + \mathrm{N}g\,|\Phi(\mathbf{r})|^2\right]\Phi(\mathbf{r}) = \mu\Phi(\mathbf{r}), \tag{1.24}$$

qui, dans le cas où $\mu \geq \mathrm{V}$, a pour solution la densité spatiale suivante :

$$n_{\mathrm{TF}}(\mathbf{r}) = \mathrm{N}\,|\Phi(\mathbf{r})|^2 = \frac{\mu - \mathrm{V}(\mathbf{r})}{g}, \tag{1.25}$$

et $n(\mathbf{r}) = 0$ autrement. Cela signifie que $\mathrm{V}(\mathbf{r}) = \mu$ aux limites du piège. D'après l'expression du potentiel (1.1), nous déduisons le rayon caractéristique du condensat :

$$\mathrm{R}_i = \sqrt{\frac{2\mu}{m\omega_i^2}}, \quad \text{avec } i \equiv x, y, z. \tag{1.26}$$

La condition de normalisation $\int d\mathbf{r}\,|\Phi(\mathbf{r})|^2 = 1$ et la densité (1.25) permettent d'écrire

$$\mathrm{N} = \frac{8\pi\mu}{15g}\bar{\mathrm{R}}^{3/2}, \tag{1.27}$$

avec $\bar{\mathrm{R}} = \left(\mathrm{R}_x\mathrm{R}_y\mathrm{R}_z\right)^{1/3}$ la moyenne géométrique des rayons dans les trois directions du piège.

Sur la Fig.1.3, la densité spatiale dans l'approximation de Thomas-Fermi (1.25) est comparée à la densité de l'approche variationnelle précédente (sans interactions), donnée par $n_0(\mathbf{r}) = \mathrm{N}\,|\Phi_0(\mathbf{r})|^2$, où $\Phi_0(\mathbf{r})$ est donnée par (1.17). Dans le cas d'un piège harmonique isotrope, il y a un élargissement du nuage ($\bar{\mathrm{R}} \simeq 4.3a_{oh}$) en raison des interactions répulsives.

L'approche de Thomas-Fermi permet de prendre en compte les interactions au sein du nuage. De plus, les conditions d'application de cette approximation (grand nombre d'atomes et interactions répulsives) correspondent aux résultats de l'expérience de refroidissement à laquelle j'ai participé. Cette dernière sera détaillée dans le chapitre suivant. Enfin il faut également noter que cette approche n'est plus valide aux frontières du nuage, lorsque la densité

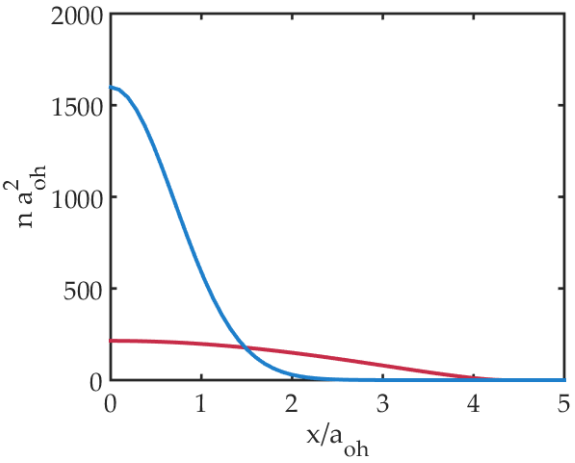


FIGURE 1.3 – **Densité atomique dans l'approximation de Thomas-Fermi.** La densité de colonne (définie par $n(x) = \int dz n(x,0,z)$) calculée dans l'approximation de Thomas-Fermi est comparée à la densité de colonne calculée dans l'approche variationnelle (sans interaction) $n_0(z)$, pour un piège harmonique isotrope avec $Na_s/a_{oh} = 100$. Les densités et la position sont exprimées en unités de a_{oh}^{-2} et a_{oh}, respectivement. Les interactions répulsives élargissent le nuage atomique, on a ici $\bar{R} \simeq 4.3 a_{oh}$.

$n(\mathbf{r})$ tend vers 0 [Dalfovo et al., 1999].

Les dernières décennies ont repoussé encore un peu plus loin la physique atteignable avec ces systèmes à N corps. La nature et la portée des interactions au sein d'un gaz peuvent être contrôlées à l'aide des résonances de Feschbach [Chin et al., 2010]. Il est également possible de changer la dimensionnalité du problème en piégeant des gaz d'atomes froids dans des potentiels optiques périodiques : les réseaux optiques [Bloch, 2005]. Ces techniques permettent d'explorer la physique des régimes fortement corrélés où l'on doit prendre en compte cette fois-ci les interactions entre les particules [Bloch et al., 2008]. Dans la section suivante nous nous intéressons au piégeage d'atomes dans les réseaux optiques.

1.2 Réseau optique

L'un des objectifs du projet AUFRONS sur lequel j'ai travaillé est de réaliser un simulateur quantique utilisant des atomes froids piégés dans un réseau optique. Ce type de système s'est fortement développé depuis plusieurs années car les atomes sont particulièrement bien contrôlés par des techniques de refroidissement et de piégeage très abouties. Un tel système d'atomes fermioniques (spin 1/2) piégés dans des potentiels optiques périodiques est analogue à des électrons au sein d'un cristal et permet l'étude de la conductivité par exemple. Dans cette section, nous allons tout d'abord présenter le principe et le formalisme du piégeage optique puis nous détaillerons le comportement des atomes au sein du réseau.

1.2.1 Force dipolaire : traitement semi-classique

Pour simplifier le formalisme de l'interaction dipolaire, nous considérons un atome à deux niveaux : $|g\rangle$ (état fondamental) et $|e\rangle$ (état excité), dont l'écart est caractérisé par une fréquence de transition ω_{eg}. De plus, nous prenons l'origine des énergies au niveau fondamental, *i.e.*, $E_g = 0$. Le hamiltonien de l'atome est alors donné par

$$\hat{\mathscr{H}}_A = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hbar\omega_{eg} |e\rangle\langle e|, \tag{1.28}$$

où $\mathbf{p}$ et m sont respectivement l'impulsion et la masse de l'atome.

Nous considérons maintenant un champ électrique oscillant à la fréquence ω sous la forme : $\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathrm{E}_0(\mathbf{r})\boldsymbol{\epsilon}\cos(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))$, où $\mathrm{E}_0(\mathbf{r},t)$ et $\Phi(\mathbf{r})$ sont respectivement l'amplitude et la phase du champ, tandis que $\boldsymbol{\epsilon}$ est le vecteur de polarisation du champ. En se plaçant dans l'approximation dipolaire-électrique (taille de l'atome très inférieure à la longueur d'onde du champ électrique) et en négligeant les interactions magnétiques, l'interaction entre l'atome positionné en $\mathbf{r}_\mathrm{A}$ et le champ électrique est caractérisée par un hamiltonien d'interaction dipolaire-électrique [Cohen-Tannoudji et al., 1996] :

$$\hat{\mathscr{H}}_\mathrm{AF} = -\hat{\mathbf{d}}\cdot\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_\mathrm{A},t), \tag{1.29}$$

avec l'opérateur moment dipolaire électrique $\hat{\mathbf{d}} = -e\hat{\mathbf{r}}$ défini par

$$\hat{\mathbf{d}} = \mathbf{d}_{ge}\left(\hat{\sigma}+\hat{\sigma}^\dagger\right), \tag{1.30}$$

où $\mathbf{d}_{ge} = \langle g|\hat{\mathbf{d}}|e\rangle$ est l'élément de matrice de la transition dipolaire et $\hat{\sigma} = |g\rangle\langle e|$. L'opérateur $\hat{\sigma}$ ($\hat{\sigma}^\dagger$) est défini comme l'opérateur de descente (de montée) car il fait passer l'atome d'un état excité e (état fondamental g) à l'état fondamental g (état excité e). De plus nous avons considéré ici que $\mathbf{d}$ était réel de sorte à ce que $\mathbf{d}_{ge} = \mathbf{d}_{eg}$. Le hamiltonien d'interaction (1.29) peut alors se réécrire :

$$\hat{\mathscr{H}}_\mathrm{AF} = \frac{\hbar\Omega}{2}\left(\hat{\sigma}+\hat{\sigma}^\dagger\right)\left[\mathrm{e}^{i(\omega t-\Phi(\hat{\mathbf{r}}_\mathrm{A}))}+\mathrm{e}^{-i(\omega t-\Phi(\hat{\mathbf{r}}_\mathrm{A}))}\right], \tag{1.31}$$

où nous avons posé la pulsation de Rabi telle que : $\Omega = d_{ge}\mathrm{E}(\hat{\mathbf{r}}_\mathrm{A})/\hbar$ avec $d_{ge} = \mathbf{d}_{ge}\cdot\boldsymbol{\epsilon}$.

Dans la suite, nous nous intéressons uniquement au degré de liberté interne, autrement dit nous oublions le terme cinétique et le hamiltonien (1.28) devient $\hat{\mathscr{H}}_\mathrm{A} = \hbar\omega_{eg}|e\rangle\langle e|$. Le hamiltonien du système s'écrit alors

$$\hat{\mathscr{H}} = \hat{\mathscr{H}}_\mathrm{A}+\hat{\mathscr{H}}_\mathrm{AF} = \hbar\omega\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma} - \hbar\delta\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma} + \frac{\hbar\Omega}{2}\left(\hat{\sigma}+\hat{\sigma}^\dagger\right)\left[\mathrm{e}^{i(\omega t-\Phi(\hat{\mathbf{r}}_\mathrm{A}))}+\mathrm{e}^{-i(\omega t-\Phi(\hat{\mathbf{r}}_\mathrm{A}))}\right], \tag{1.32}$$

où nous avons introduit le désaccord laser $\delta = \omega - \omega_{eg}$.

Pour simplifier le problème, nous effectuons une transformation dans la représentation d'interaction, *i.e.*, dans le référentiel tournant forcé à la fréquence ω, à partir de l'opérateur unitaire d'évolution temporelle

$$\hat{\mathrm{U}}(t) = \mathrm{e}^{i\hat{\mathscr{H}}_0 t/\hbar}, \tag{1.33}$$

avec $\hat{\mathscr{H}}_0 = \hbar\omega\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma}$, ce qui donne le nouvel hamiltonien suivant [1] :

$$\hat{\mathscr{H}}^{int} = -\hbar\omega\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma} + \hat{\mathrm{U}}\hat{\mathscr{H}}\hat{\mathrm{U}}^\dagger = -\hbar\delta\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma} + \frac{\hbar\Omega}{2}\left[\hat{\sigma}^\dagger\mathrm{e}^{-\Phi(\hat{\mathbf{r}}_\mathrm{A})}+\hat{\sigma}\mathrm{e}^{-\Phi(\hat{\mathbf{r}}_\mathrm{A})}\right]. \tag{1.34}$$

Pour retrouver cette expression, nous nous sommes placés dans l'approximation des ondes tournantes, valable lorsque le laser est faiblement désaccordé ($|\delta| << \omega_{eg},\omega$). Cela permet de négliger les termes oscillant à la fréquence $\pm 2\omega$ car sur une période optique, ils se moyennent temporellement très vite à 0.

1. Le nouvel état transformé est donné par $|\Psi\rangle_\mathrm{I} = \hat{\mathrm{U}}(t)|\Psi\rangle_\mathrm{S}$, où les indices I et S sont associés aux représentations d'interaction et de Schrödinger, respectivement. L'équation de Schrödinger nous donne : $i\hbar\frac{\partial|\Psi\rangle_\mathrm{S}}{\partial t} = \hat{\mathscr{H}}|\Psi\rangle_\mathrm{S}$, soit encore

$$\begin{aligned}
& i\hbar\frac{\partial\hat{\mathrm{U}}^\dagger}{\partial t}|\Psi\rangle_\mathrm{I} + i\hbar\hat{\mathrm{U}}^\dagger(t)\frac{\partial|\Psi\rangle_\mathrm{I}}{\partial t} = \hat{\mathscr{H}}\hat{\mathrm{U}}^\dagger(t)|\Psi\rangle_\mathrm{I} \\
\Leftrightarrow\quad & \hbar\omega\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma}\hat{\mathrm{U}}^\dagger(t)|\Psi\rangle_\mathrm{I} + i\hbar\hat{\mathrm{U}}^\dagger(t)\frac{\partial|\Psi\rangle_\mathrm{I}}{\partial t} = \hat{\mathscr{H}}\hat{\mathrm{U}}^\dagger(t)|\Psi\rangle_\mathrm{I} \\
\Leftrightarrow\quad & i\hbar\frac{\partial|\Psi\rangle_\mathrm{I}}{\partial t} = \left[-\hbar\omega\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma} + \hat{\mathrm{U}}(t)\hat{\mathscr{H}}\hat{\mathrm{U}}^\dagger(t)\right]|\Psi\rangle_\mathrm{I},
\end{aligned}$$

où nous avons multiplié par l'opérateur $\hat{\mathrm{U}}(t)$ par la gauche de l'équation pour passer à la dernière ligne. Nous identifions alors le hamiltonien d'interaction $\hat{\mathscr{H}}^{int}$ comme le terme entre parenthèses à droite de l'équation.

De cet hamiltonien dérive un opérateur force tel que

$$\hat{\mathscr{F}} = -\nabla\hat{\mathscr{H}}^{int} = \underbrace{-\frac{\hbar\nabla\Omega}{2}\left[\hat{\sigma}^{\dagger}e^{-\Phi(\hat{\mathbf{r}}_A)} + \hat{\sigma}e^{-\Phi(\hat{\mathbf{r}}_A)}\right]}_{\hat{\mathscr{F}}_{dip}} + \underbrace{i\frac{\hbar\Omega}{2}\nabla\Phi(\hat{\mathbf{r}}_A)\left[\hat{\sigma}^{\dagger}e^{-\Phi(\hat{\mathbf{r}}_A)} + \hat{\sigma}e^{-\Phi(\hat{\mathbf{r}}_A)}\right]}_{\hat{\mathscr{F}}_{sc}}. \tag{1.35}$$

Cet opérateur force se décompose donc en deux parties :

• la première notée $\hat{\mathscr{F}}_{dip}$ est proportionnelle au gradient d'amplitude du champ, on l'appelle **force dipolaire**. Dans le cas de deux ondes planes contra-propageantes, seul ce terme est non-nul. On a alors une force conservative qui permet de piéger les atomes, comme nous le verrons dans la section suivante.

• la seconde notée $\hat{\mathscr{F}}_{sc}$ est proportionnelle au gradient de phase du champ, on l'appelle **force de pression de radiation**. Dans le cas d'une onde plane progressive, seul ce terme est non-nul. On a alors une force dissipative qui permet de refroidir des atomes, comme nous le verrons dans le chapitre suivant.

Considérons une phase nulle $\Phi(\mathbf{r}) = 0$, de sorte à ce que $\hat{\mathscr{F}} = \hat{\mathscr{F}}_{dip}$, ce qui est le cas pour deux ondes planes contra-propageantes où la phase est constante, *i.e.* $\hat{\mathscr{F}}_{sc} = \hat{0}$. Pour un désaccord laser grand devant la pulsation de Rabi ($|\delta| >> \Omega$), le décalage en énergie d'un niveau i dû à l'interaction entre l'atome et la lumière est donnée par la théorie des perturbations au second ordre [Grimm et al., 2000] :

$$\Delta E_i = \sum_{j\neq i} \frac{\left|\langle j|\hat{\mathscr{H}}^{int}_{AF}|i\rangle\right|^2}{\varepsilon_i - \varepsilon_j}, \tag{1.36}$$

où la somme porte sur les transitions possibles vers les niveaux j. L'énergie ε_i est l'énergie totale du système {atome+champ} [2], ainsi pour l'état fondamental $|g\rangle$ l'énergie interne de l'atome est nulle et si l'on considère n photons d'énergie $\hbar\omega$ dans le champ électromagnétique, l'énergie totale est donnée par $\varepsilon_g = n\hbar\omega$. Pour l'état $|e\rangle$ l'énergie de l'atome est $\hbar\omega_{eg}$ et on a $n-1$ photons dans le champ dû à l'absorption d'un photon par l'atome, soit une énergie $\varepsilon_e = \hbar\omega_{eg} + (n-1)\hbar\omega$. Pour un atome à deux niveaux, on a par conséquent $\varepsilon_i - \varepsilon_j = \pm\hbar\delta$, soit $\Delta E_g = -\Delta E_e$. Ainsi l'interaction avec le champ décale en énergie l'état fondamental d'une quantité

$$\Delta E_g = \frac{\hbar|\Omega|^2}{4\delta}. \tag{1.37}$$

On parle également de déplacement lumineux. Nous constatons que le décalage en énergie est proportionnel à l'intensité lumineuse (on rappelle que $|\Omega|^2 \propto |E|^2$). Ce phénomène physique est nommé effet Stark dynamique (ou *AC Stark shift*). Par ailleurs ce déplacement énergétique dépend du signe du désaccord laser, ainsi la force qui dérive de ce potentiel attire les atomes sur les maxima ou minima d'intensité selon que le laser est désaccordé sur le rouge ou sur le bleu, respectivement. Le décalage en énergie pour un atome à deux niveaux est schématisé en Fig.1.4.

Cette force dipolaire est notamment utilisée pour piéger spatialement les atomes [Metcalf and van der Straten, 2003]. Cette interaction atome-champ est également un ingrédient clé de notre méthode de piégeage, dont les calculs seront détaillés au Chapitre 3.

1.2.2 Génération d'un potentiel structuré : réseau optique

Un réseau optique à une dimension est le résultat d'interférences entre deux lasers contra-propageants qui vont interagir avec l'atome, *via* son moment dipolaire électrique, et ainsi en-

2. Cette approche, appelée atome habillé, sera vue plus en détail dans le Chapitre 4.

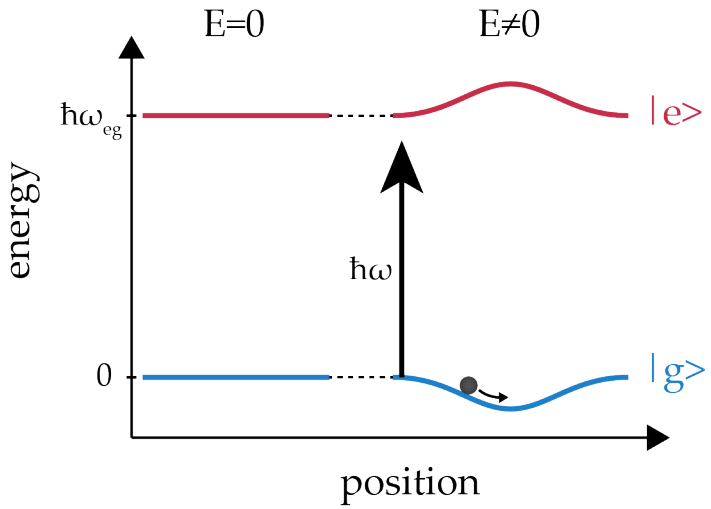


FIGURE 1.4 – **Schéma des déplacements lumineux d'un atome à deux niveaux.** En l'absence de champ ($E = 0$) les niveaux ne sont pas perturbés. Lorsqu'un champ électrique est appliqué ($E \neq 0$), les niveaux sont déplacés selon l'équation (1.37). Nous supposons un faisceau laser gaussien et désaccordé sur le rouge ($\delta < 0$). Le déplacement énergétique prend la forme gaussienne du faisceau et dépend alors de la position de l'atome. Pour l'état fondamental (en bleu), un puits est formé dans lequel un atome peut être piégé.

gendrer une force périodique qui va l'attirer (ou le repousser selon la fréquence des lasers) vers les minima d'intensité.

Si nous prenons deux champs contra-propageants dans la direction (Ox) sous la forme $E_\pm(x) = E_0 \sin(kx \pm \varphi_\pm)$, où nous notons E_0 et $\varphi_\pm$ l'amplitude et la phase du champ, respectivement. Le champ se propage avec un vecteur d'onde k. Leurs interférences génèrent une onde stationnaire de la forme $E(x) \propto 2E_0 \sin(kx+\varphi)$ avec $\varphi = (\varphi_+ - \varphi_-)/2$, ainsi en se rappelant l'expression de la pulsation de Rabi, le potentiel (1.37) prend la forme suivante [3] :

$$V(x) = V_0 \sin^2(kx), \qquad \text{avec} \quad V_0 = \frac{d_{ge}^2 |E_0|^2}{\hbar\Delta}. \tag{1.38}$$

Nous obtenons alors un réseau optique à une dimension de profondeur V_0 dans lequel les atomes sont piégés aux maxima ou minima d'intensité, selon le signe du désaccord Δ (voir section précédente). La période du réseau vaut alors $\ell = \lambda/2$, où λ est la longueur d'onde du laser. De plus, nous constatons que la profondeur du réseau V_0 peut être modulée en modifiant la puissance du laser.

Si les faisceaux lasers forment un angle θ entre eux, alors la période du réseau optique est simplement donnée par $\ell = \lambda/[2\sin(\theta/2)]$. Un réseau optique à deux ou trois dimensions s'implémente de manière directe en ajoutant une paire de faisceaux lasers pour chaque direction de l'espace. Ces réseaux sont schématisés en Fig.1.5.

Un atome évoluant dans un le potentiel de la forme (1.38) est décrit par le hamiltonien suivant :

$$\hat{\mathscr{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}). \tag{1.39}$$

L'équation aux valeurs propres de cet hamiltonien nous donne

$$-\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\Psi''(x) + V_0 \sin^2(kx)\Psi(x) = E\Psi(x), \tag{1.40}$$

où nous posons E les énergies propres. Cette expression nous permet de définir une nouvelle échelle d'énergie pour les réseaux :

$$E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \tag{1.41}$$

3. Nous considérons ici que $\varphi = 0$ à l'origine $x = 0$.

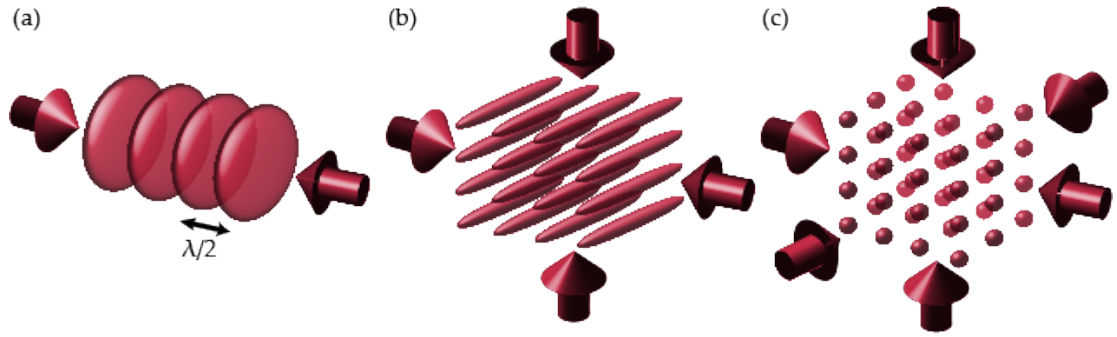


FIGURE 1.5 – **Réseaux optiques.** La dimension du réseau optique peut être fixée en prenant un nombre de faisceaux adéquat pour réaliser un réseau (a) 1D : les atomes sont piégés dans des nappes de lumière, (b) 2D : les atomes sont piégés dans des tubes de lumière ou (c) 3D : les atomes sont arrangés de la même manière que dans un cristal. La période du réseau (distance intersite) est donnée par $\ell = \lambda/2$, où λ est la longueur d'onde des lasers.

que l'on nomme énergie de recul. Ainsi on parlera par exemple de la profondeur du réseau en unité de E_r.

1.2.3 Théorème de Bloch

Le réseau optique possède une période spatiale ℓ, ainsi nous pouvons chercher des états propres qui décrivent le mouvement des atomes dans le réseau périodique sous la forme de fonctions de Bloch [Neil W. Ashcroft, 1976] :

$$\Psi_q^{(n)}(x) = u_q^{(n)}(x) e^{iqx}, \tag{1.42}$$

qui sont égales au produit d'une onde plane avec un quasi-moment q et d'une fonction périodique $u_q^{(n)}(x)$, où $n \in \mathbb{Z}$ est un indice qui correspond à une bande avec une certaine énergie. Cette fonction périodique peut se développer en série de Fourier :

$$u_q^{(n)}(x) = \sum_\alpha c_\alpha^{(n,q)} e^{i2\alpha kx}, \tag{1.43}$$

avec $\alpha \in \mathbb{Z}$ et $k = \pi/\ell$. Nous cherchons alors des fonctions propres de la forme

$$\Psi_q^{(n)}(x) = \sum_\alpha c_\alpha^{(n,q)} e^{i(q+2\alpha\pi/\ell)x}. \tag{1.44}$$

La périodicité du problème restreint la définition du quasi-moment sur la première zone de Brillouin : $q \in [-\pi/\ell, \pi/\ell]$, cela permet d'éviter de compter plusieurs fois les mêmes valeurs propres.

L'équation aux valeurs propres est donnée par

$$\hat{\mathscr{H}}\Psi_q^{(n)}(x) = E_q^{(n)}\Psi_q^{(n)}(x), \tag{1.45}$$

où $\hat{\mathscr{H}}$ est défini par (1.39). Ainsi d'après l'expression des fonctions de Bloch (1.42), cette équation peut se réécrire

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u_q^{(n)}(x) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} u_q^{(n)}(x) + V(\hat{x}) u_q^{(n)}(x) = E_q^{(n)} u_q^{(n)}(x), \tag{1.46}$$

soit encore

$$\hat{\mathscr{H}}_q u_q^{(n)}(x) = E_q^{(n)} u_q^{(n)}(x), \qquad \text{avec} \qquad \hat{\mathscr{H}}_q = \frac{(\hat{p} + \hbar q)^2}{2m} + V(\hat{x}). \tag{1.47}$$

Le potentiel optique (1.38) où $V_0 > 0$ (*i.e.*, le laser est désaccordé sur le bleu) possède la même périodicité que les fonctions $u_q^{(n)}(x)$ et peut également se décomposer en série de Fourier :

$$V(x) = \sum_\beta V_\beta e^{i2\beta kx}, \tag{1.48}$$

avec $\beta \in \mathbb{Z}$. D'après la forme du potentiel, en notant que $\sin^2(kx) = -(e^{2ikx} - e^{-2ikx} - 2)/4$, nous remarquons que la somme (1.48) se réduit à trois termes :

$$V(x) = \frac{V_0}{2} - \frac{V_0}{4}\left[e^{i2kx} + e^{-i2kx}\right]. \tag{1.49}$$

Avec les expressions des fonctions périodiques (1.43) et du potentiel (1.48), nous pouvons réécrire l'équation aux valeurs propres (1.47) sous une forme matricielle avec chaque élément de la forme

$$\left[\left(2\alpha + \frac{q}{k}\right)^2 + \frac{V_0}{2E_r}\right] c_\alpha^{(n,q)} - \frac{V_0}{4E_r}\left(c_{\alpha+1}^{(n,q)} + c_{\alpha-1}^{(n,q)}\right) = \frac{E_q^{(n)}}{E_r} c_\alpha^{(n,q)}, \tag{1.50}$$

où nous avons utilisé le fait que $u_{q+2\pi/\ell}(x) = u_q(x)e^{-2i\pi/\ell}$, soit encore $c_\alpha^{(n,q+2\pi/\ell)} = c_{\alpha+1}^{(n,q)}$ d'après (1.43).

Nous avons finalement le système suivant :

$$\sum_\alpha \hat{\mathscr{H}}_{\alpha,\alpha'} c_\alpha^{(n,q)} = \frac{E_q^{(n)}}{E_r} c_\alpha^{(n,q)}, \tag{1.51}$$

où les éléments de matrice du hamiltonien sont donnés par

$$\hat{\mathscr{H}}_{\alpha,\alpha'} = \left[\left(2\alpha + \frac{q}{k}\right)^2 + \frac{V_0}{2E_r}\right]\delta_{\alpha,\alpha'} - \frac{V_0}{4E_r}\delta_{|\alpha-\alpha'|,1}, \tag{1.52}$$

où $\delta_{i,j}$ est le signe de Kronecker ($\delta_{i,j} = 1$ si $i = j$ et 0 si $i \neq j$).

Les énergies propres correspondantes sont tracées en Fig.1.6 en fonction du quasi-moment q pour différentes profondeurs de réseaux. Ces bandes d'énergies sont comparées à l'énergie d'une particule libre, dont les états propres sont des ondes planes et dont les énergies propres suivent une parabole en $\mathbf{p}^2/2m$.

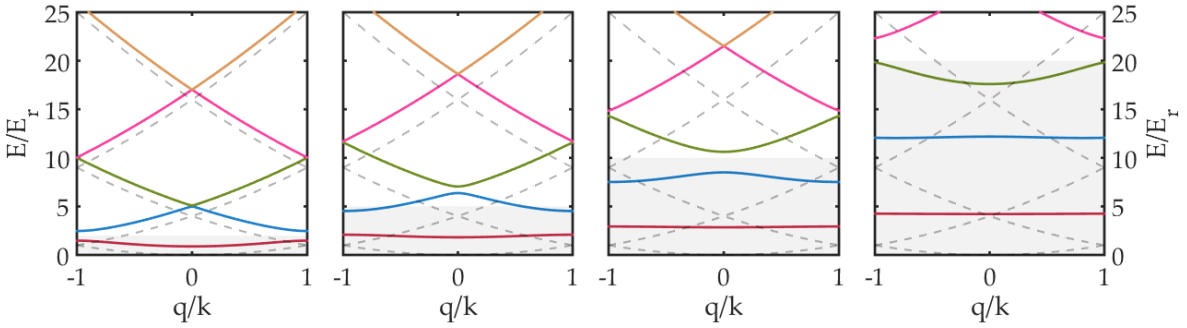


FIGURE 1.6 – **Bandes d'énergie dans un réseau optique en fonction du quasi-moment et de la profondeur du réseau.** Représentation des premières bandes d'énergie dans un réseau optique en fonction du quasi-moment q normalisé au vecteur d'onde du réseau $k = \pi/\ell$. Les énergies sont en unité d'énergie de recul E_r. Les spectres d'énergie sont tracés pour différentes profondeurs de réseau correspondant aux zones grisées, de gauche à droite : $V_0/E_r = (2, 5, 10, 20)$. Les traits en pointillés correspondent au cas d'une particule libre ($V_0/E_r = 0$).

Le spectre en énergie d'une particule piégée dans un réseau donne des bandes d'énergie permises $E_q^{(n)}$ de largeurs

$$W^{(n)} = \left[\min_q E_q^{(n)}, \max_q E_q^{(n)}\right]. \tag{1.53}$$

Ces bandes d'énergies sont d'autant plus petites que la profondeur du réseau est grande. Les distances entre ces dernières (appelées *gaps* d'énergie) deviennent quant à elles plus grandes. La probabilité pour la particule de passer d'une bande à l'autre est alors plus faible, car cela nécessite plus d'énergie pour franchir ce *gap*.

1.3 Energies dans le régime des liaisons fortes

Nous nous plaçons dorénavant dans le régime des liaisons fortes, c'est-à-dire des réseaux profonds : $V_0/E_r >> 1$.

1.3.1 Fonctions de Wannier

Dans ce régime, les atomes ont tendance à être confinés sur les sites du réseau. Les ondes de Bloch étant délocalisées, il est plus commode d'utiliser une nouvelle base de fonctions que l'on appelle *fonctions de Wannier* et qui sont localisées sur les sites du réseau. Ces fonctions sont propres à chaque bande d'énergie n, et sont définies à une dimension par [Wannier, 1937]

$$w_j^{(n)}(x) = \sqrt{\frac{\ell}{2\pi}} \int_{-\pi/\ell}^{\pi/\ell} \Psi_q^{(n)}(x) e^{-ij\ell q} dq. \tag{1.54}$$

L'indice $j \in \mathbb{Z}$ caractérise un site du réseau. En choisissant le bon facteur de normalisation cette base est orthonormée, elle obéit à la relation :

$$\int w_j^{(n)}(x) w_{j'}^{(n')}(x) dx = \delta_{j,j'} \delta_{n,n'}, \tag{1.55}$$

avec le signe de Kronecker $\delta_{i,j} = 1$ si $i = j$, et 0 autrement.

Avec la périodicité des fonctions de Bloch, nous avons par translation [4] : $w_0^{(n)}(x - j\ell) = w_j^{(n)}(x)$, où nous rappelons que ℓ est la période du réseau. Nous constatons alors qu'il suffit de connaître $w_0^{(n)}(x)$ pour caractériser toutes les autres fonctions. Nous avons tracé en Fig.1.7 l'évolution du profil spatial des fonctions de Wannier pour différentes profondeurs de réseaux optiques. Nous observons bien le confinement de ces états lorsque la profondeur du réseau augmente.

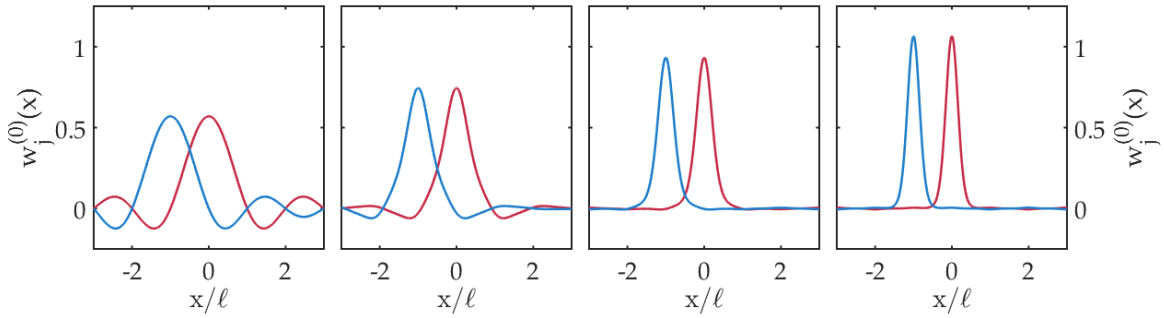


FIGURE 1.7 – **Fonctions de Wannier $w_j^{(0)}(x)$ pour différentes profondeurs de réseaux.** Représentation des fonctions de Wannier $w_0^{(0)}(x)$ (rouge) et $w_0^{(0)}(x-\ell)$ (bleu) d'un réseau en fonction de la position normalisée par la période, pour différentes profondeurs de réseaux. De gauche à droite : $V_0/E_r = (0, 2, 8, 20)$.

Pour des réseaux profonds, le potentiel de piégeage peut être approché par une fonction quadratique autour de $x = 0$: $V(x) \sim V_0 k^2 x^2$. Nous se retrouvons alors avec un ensemble de

4. La définition (1.54) dépend de la phase que l'on donne aux ondes de Bloch. D'après [Kohn 1959] il existe une unique valeur de cette phase pour que les fonctions de Wannier soient réelles, symétriques ou antisymétriques pour $x = 0$ ou $x = \ell/2$, et qu'elles chutent exponentiellement à l'infini. Dans le cas étudié ici nous avons $\Psi_q^{(n)}(-x) = \Psi_q^{(n)*}(x) = \Psi_{-q}^{(n)}(x)$.

pièges harmoniques indépendants et localisés sur chaque site du réseau, comme le montre la Fig.1.8. Pour la bande d'énergie minimale, la fonction de Wannier se rapproche alors d'une gaussienne dont l'expression approchée vaut

$$w_0^{(0)}(x) \simeq \left(\frac{1}{\pi a_{oh}^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/2a_{oh}^2}, \tag{1.56}$$

où $a_{oh} = \sqrt{\hbar/m\omega}$ est l'extension de l'état fondamental avec la pulsation qui vérifie la relation $\hbar\omega = 2\sqrt{V_0 E_r}$, d'après la définition du potentiel $V(x)$.

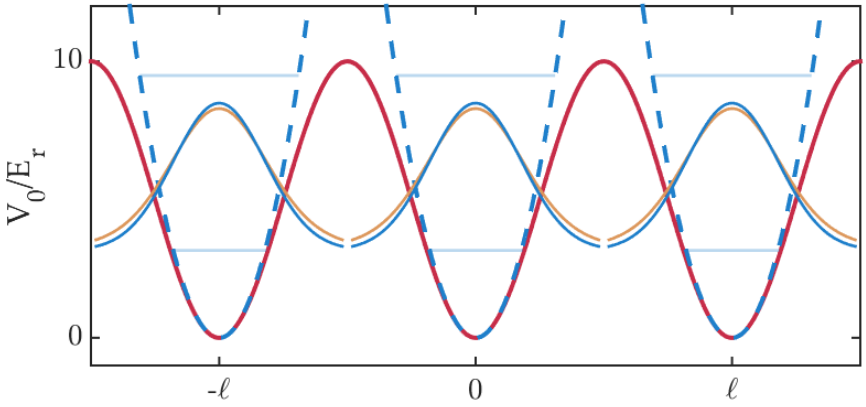


FIGURE 1.8 – **Approximation des sites du réseau par des potentiels harmoniques.** Un réseau optique (rouge) de profondeur $V_0/E_r = 10$ peut être approché par une collection de potentiels harmoniques (pointillés bleus) localisés sur chaque site. L'approximation (1.56) de la fonction d'onde atomique par une gaussienne dans le cas d'un potentiel harmonique (bleu) s'approche très bien de la fonction de Wannier $w_j^{(0)}$ (orange) calculée à partir de 1.54, pour des atomes dans l'état fondamental. Un facteur multiplicatif ×4 a été appliqué aux amplitudes des fonctions d'ondes pour mieux les distinguer.

Cette approximation d'états individuels et localisés fait disparaître toute connexion vers un site voisin *via* l'énergie cinétique (par effet tunnel). En effet, nous négligeons ici la courbure des bandes d'énergie qui est pourtant bien présente, même dans le régime $V_0/E_r >> 1$. Formulé autrement, les ailes de la fonction de Wannier, localisée sur un site, s'étalent en réalité sur les sites voisins, il y a donc un peu de recouvrement, et donc un possible effet tunnel.

Par ailleurs, on peut montrer que dans cette limite des réseaux forts, la largeur de la bande fondamentale peut se mettre sous la forme [Pethick and Smith, 2008]

$$W^{(0)} = \frac{16}{\sqrt{\pi}} E_r \left(\frac{V_0}{E_r}\right)^{3/4} e^{-2\sqrt{V_0/E_r}}. \tag{1.57}$$

Les fonctions de Wannier permettent d'attribuer aux atomes une position moyenne (sur chaque site) et de prendre en compte l'interaction entre particules (car l'interaction prédominante dans un réseau est l'interaction sur site).

1.3.2 Hamiltonien de Bose-Hubbard

A une dimension, des bosons sans spin piégés dans un réseau optique sont décrits, en seconde quantification, par le hamiltonien suivant [Dalfovo et al., 1999] :

$$\hat{\mathcal{H}}_{BH} = \underbrace{\int dx \hat{\Psi}^\dagger(x)\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\right)\hat{\Psi}(x)}_{\hat{\mathcal{H}}_{cin}} + \underbrace{\frac{g^{(1)}}{2}\int \hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(x)\hat{\Psi}(x)dx}_{\hat{\mathcal{H}}_{int}}, \tag{1.58}$$

où l'opérateur champ $\hat{\Psi}(x)$ (resp. $\hat{\Psi}^\dagger(x)$) détruit (resp. crée) une particule au point x et $g^{(1)}$ est la constante de couplage pour un réseau 1D. Les fonctions de Wannier forment une base complète, ainsi cet opérateur peut s'écrire tel que

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_{n,j} w_j^{(n)}(x)\hat{b}_j^{(n)}, \tag{1.59}$$

où l'opérateur $\hat{b}_j^{(n)}$ est l'opérateur destruction pour une particule dans un site j de la bande n.

Nous nous intéressons tout d'abord au premier terme défini dans (1.58) par $\hat{\mathscr{H}}_{cin}$. Dans le cas de réseaux profonds ($V_0/E_r >> 1$), la dynamique du système se limite à la bande d'énergie fondamentale ($n = 0$). En notant $\hat{b}_j^{(0)} \equiv \hat{b}_j$, le terme cinétique devient alors

$$\hat{\mathscr{H}}_{cin} = -\sum_{i,j} t_{ij}\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j, \tag{1.60}$$

où

$$t_{ij} = -\int dx\, w_i^{(0)}(x)\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\right) w_j^{(0)}(x) \tag{1.61}$$

est l'énergie liée à la possibilité pour un atome d'aller du site i au site j par effet tunnel. Par ailleurs dans les réseaux considérés ici, la profondeur étant élevée, nous nous restreignons aux sauts par effet tunnel entre plus proches voisins : $t_{ij} \equiv t$. Ainsi nous avons finalement

$$\hat{\mathscr{H}}_{cin} = -t\sum_{<i,j>} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j, \tag{1.62}$$

où la somme est portée sur les proches voisins.

Le second terme de (1.58) noté $\hat{\mathscr{H}}_{int}$ traduit les interactions entre les particules au sein du réseau. La force de ce couplage entre deux particules est définie par la variable $g^{(1)}$, qui diffère du cas 3D où $g^{(3)} = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ dans le cas d'interactions à courte portée (cf. section 1.1.3). Dans le cas de réseaux profonds, nous rappelons que nous nous intéressons uniquement à la bande d'énergie $n = 0$, ainsi, d'après l'expression de (1.59), le terme d'interaction devient

$$\hat{\mathscr{H}}_{int} = \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} U_{ijkl}\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k \hat{b}_l, \tag{1.63}$$

où

$$U_{ijkl} = g^{(1)}\int w_{0,i}(x)\, w_{0,j}(x)\, w_{0,k}(x)\, w_{0,l}(x)\, dx \tag{1.64}$$

est l'énergie d'interaction hors-site (entre les sites i, j, k et l).

En notant que dans le régime $V_0/E_r >> 1$ le recouvrement entre deux fonctions $w_j^{(0)}(x)$ de sites voisins est négligeable, nous pouvons nous restreindre à ne considérer que l'interaction d'atomes sur un même site (*i.e.*, $i = j = k = l$). En introduisant l'opérateur nombre de particules sur un site j : $\hat{n}_j = \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j$ et en utilisant la relation de commutation $\left[\hat{b}_j, \hat{b}_j^\dagger\right] = \mathbf{1}$, nous simplifions davantage (1.63) :

$$\hat{\mathscr{H}}_{int} \approx \frac{U}{2}\sum_j \hat{n}_j\left(\hat{n}_j - 1\right) \tag{1.65}$$

où $U \equiv U_{0000} = g^{(1)}\int w_{0,0}^4(x)$ est l'énergie à fournir pour placer deux atomes sur un même site. D'après la forme de (1.65), nous observons bien que cet hamiltonien est non-nul si 2 atomes ou plus sont présents sur le même site j dans le même état de Wannier.

Au final, le hamiltonien de Bose-Hubbard (1.58) peut se réécrire :

$$\hat{\mathscr{H}}_{BH} = -t\sum_{<i,j>} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{U}{2}\sum_j \hat{n}_j\left(\hat{n}_j - 1\right) + \sum_j \epsilon_j \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j, \tag{1.66}$$

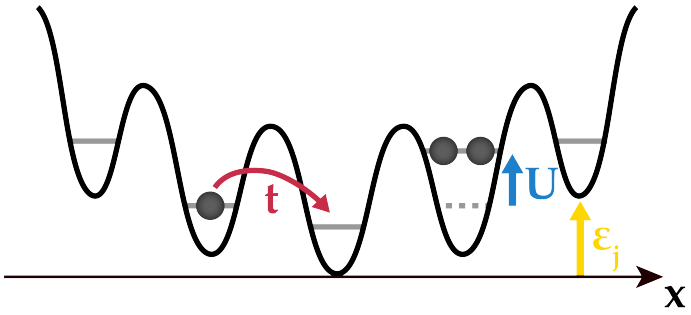


FIGURE 1.9 – **Schéma des énergies au sein d'un réseau optique.** Différentes énergies régissent l'évolution d'atomes dans un réseau optique : l'énergie par effet tunnel t (rouge) caractérise l'énergie pour un atome d'aller d'un site à un autre *via* l'effet tunnel, l'énergie d'interaction U (bleu) caractérise l'énergie à fournir pour placer deux atomes sur un même site et l'énergie ϵ_j (jaune) caractérise le décalage énergétique dû au confinement externe.

où le dernier terme a été ajouté pour tenir compte des effets d'anisotropie du piège ou d'un potentiel externe, ϵ_j étant le décalage en énergie inclut par ces derniers à la position considérée. Ces différentes énergies sont schématisées en Fig.1.9.

Selon les valeurs de U et t le système peut entrer dans différents régimes, c'est ce que nous allons étudier dans la prochaine partie.

1.3.3 Énergies du réseau

Dans cette partie nous négligeons le terme d'*offset* en énergie ($\epsilon_j = 0$), pour nous focaliser sur les termes d'énergie par effet tunnel t et d'interaction U.

Énergie d'effet tunnel

Intéressons-nous dans un premier temps à l'énergie par effet tunnel définie par (1.61). Dans le cas où l'on a pas d'interactions (U = 0), on montre que les énergies propres de la première bande $n = 0$ se mettent sous la forme [Jaksch and Zoller, 2005]

$$\mathrm{E}_q^{(0)} = -2t\cos(q\ell). \tag{1.67}$$

D'après la définition (1.53), cela correspond a une largeur énergétique $\mathrm{W}^{(0)} = 4t$ pour la première bande fondamentale. Par identification avec (1.57), nous avons alors dans le régime des liaisons fortes

$$\frac{t}{\mathrm{E}_r} \approx \frac{4}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\mathrm{V}_0}{\mathrm{E}_r}\right)^{3/4} \mathrm{e}^{-2\sqrt{\mathrm{V}_0/\mathrm{E}_r}}. \tag{1.68}$$

De manière plus générale l'énergie par effet tunnel, dans le régime des liaisons fortes, est donnée par

$$\frac{t^{(\alpha)}}{\mathrm{E}_r} \approx \frac{4}{\alpha\sqrt{\pi}}\left(\frac{\mathrm{V}_0}{\mathrm{E}_r}\right)^{3/4} \mathrm{e}^{-2\sqrt{\mathrm{V}_0/\mathrm{E}_r}}, \tag{1.69}$$

où $\alpha = 1, 2, 3$ correspond à la dimensionnalité du système.

La présence de l'exponentielle indique que ce terme cinétique devient rapidement négligeable avec la profondeur du réseau.

Énergie d'interaction sur site

Considérons à présent le cas opposé où le terme énergétique U domine le système comparé à l'énergie tunnel t. D'après son expression (1.64) nous rappelons que nous avons

$$\mathrm{U} = g^{(1)} \int_{-\infty}^{\infty} w_{0,0}^4(x), \tag{1.70}$$

soit encore, en prenant la forme approchée de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique (1.56) pour la fonction de Wannier,

$$U \approx \frac{g^{(1)}}{\pi a_{oh}^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2x^2/a_{oh}^2} = \frac{g^{(1)}}{a_{oh}\sqrt{2\pi}}. \tag{1.71}$$

De la même manière que pour l'énergie par effet tunnel, ce résultat peut se généraliser à l'expression suivante :

$$U^{(\alpha)} \approx \frac{g^{(\alpha)}}{\left(a_{oh}\sqrt{2\pi}\right)^{\alpha}}, \tag{1.72}$$

où $\alpha = 1,2,3$ correspond à la dimensionnalité du puits dans lequel l'atome est piégé.

En utilisant l'expression de la dimension caractéristique a_{oh} sur laquelle la particule s'étend dans l'état fondamental ($n = 0$) pour $V_0/E_r >> 1$ (définie en (1.56)), nous pouvons écrire l'énergie (1.72) dans le cas d'un puits à 3 dimensions sous une forme plus explicite :

$$\frac{U^{(3)}}{E_r} \approx \frac{8\pi}{(2\pi)^{3/2}} k a_s \left(\frac{V_0}{E_r}\right)^{3/4}, \tag{1.73}$$

où nous avons remplacé la constante de couplage $g^{(3)}$ par son expression (cf. section 1.1.3 où $g^{(3)} \equiv g$).

Avec ce résultat nous constatons que les interactions augmentent de manière plus modérée avec la profondeur du réseau optique, contrairement à l'énergie cinétique (1.69). En augmentant les barrières de potentiel, les fonctions d'ondes de deux particules sur un même site vont davantage se recouvrir, ainsi les interactions seront plus fortes (cf. (1.64)), et l'interaction répulsive entre deux particules tend à une distribution de un atome par site.

En notant que le rapport V_0/E_r dépasse rarement quelques dizaines et que pour des longueurs d'ondes micrométriques on a $ka_s \sim 10^{-2} - 10^{-1}$ ($a_s \sim$ qlqs nm), nous observons que les énergies t et U sont inférieures à l'énergie de recul E_r. Cela se confirme sur la Fig.1.10 où nous avons tracé leurs évolutions en fonction de la profondeur d'un réseau à 3 dimensions ($\alpha = 3$), pour un atome de ^{87}Rb ($a_s \approx 100 a_0$).

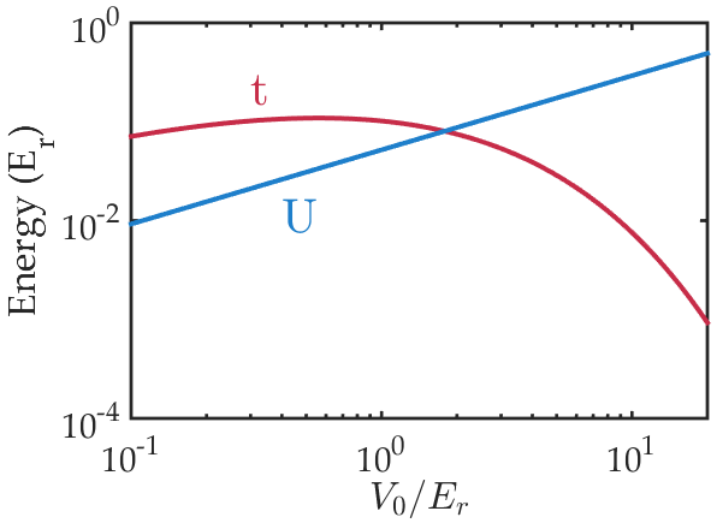


FIGURE 1.10 – **Energies tunnel et d'interaction en fonction de la profondeur du réseau optique.** Evolution des énergies tunnel t (rouge) et d'interaction U (bleu) en fonction de la profondeur du réseau V_0/E_r. Ces énergies ont été calculées pour un réseau et un puits 3D à partir des relations (1.69) et (1.73).

Nous rappelons que les expressions (1.69) et (1.73) ne sont valables que dans le régime

des liaisons fortes [5], ce qui biaise un peu les valeurs pour les faibles valeurs de V_0/E_r. En revanche nous pouvons noter un certain comportement : pour des faibles profondeurs, l'énergie cinétique t domine, les particules ont tendance à être délocalisées, on est alors dans un régime de *superfluiditité*. A l'inverse pour des réseaux optiques profonds, l'énergie tunnel est négligeable comparée à l'énergie d'interaction U, les particules sont confinées sur chaque site, c'est le régime *isolant de Mott*. Ce changement de régime est une transition de phase superfluide-isolant [Fisher et al., 1989]. Afin d'observer cette transition de phase, [Jaksch et al., 1998] proposèrent de charger des atomes froids dans un réseau optique et augmenter la profondeur de ce dernier. C'est en 2001 que cette transition a été observée expérimentalement [Greiner et al., 2002]. Dans cette expérience, un BEC est chargé dans un réseau à trois dimensions dont la profondeur est augmentée progressivement, afin de passer du régime superfluide ($t >> U$) au régime d'isolant de Mott ($t << U$).

1.3.4 Condensat dans un réseau optique

La distribution d'atomes dans un réseau optique se fait en chargeant un BEC. Ce chargement doit se faire en allumant progressivement les lasers qui forment le réseau optique de manière à ce que les atomes restent dans leur état fondamental. On appelle cette condition sur le chargement la condition d'adiabaticité, qui introduit deux échelles de temps. Le transfert doit être :

• *adiabatique par rapport à la population de la bande* : afin d'éviter le transfert d'une partie de la population dans les bandes excitées. L'énergie pertinente est alors le gap entre bande fondamentale et bande excitée. Pour un système initialement dans son état fondamental (bande d'énergie $n = 0$) préparé dans un état $q = 0$, ce critère est donné par [Ben Dahan et al., 1996]

$$\left|\langle\Psi_{n,q}|\frac{d}{dt}|\Psi_{0,q}\rangle\right| << \left|E_q^{(n)} - E_q^{(0)}\right|/\hbar, \quad \text{où } n \neq 0. \tag{1.74}$$

Dans le cas où $V_0/E_r \leq 1$, pour $q \approx 0$ on a $\left|E_q^{(1)} - E_q^{(0)}\right| \sim 4E_r$, car on rappelle que les énergies propres sont données par $E_q^{(n)} = \left(q \pm 2n\hbar k\right)^2/2m$ quand $V_0 \to 0$ (*i.e.*, le spectre d'une particule libre). En déterminant les états propres de manière perturbative pour des réseaux faibles, on peut montrer que l'inégalité (1.74) devient [Ben Dahan et al., 1996]

$$\frac{\sqrt{2}}{16}\frac{d}{dt}\frac{V_0}{E_r} << \frac{4E_r}{\hbar}. \tag{1.75}$$

Nous rappelons que V_0/E_r correspond à la profondeur du réseau que l'on augmente progressivement ici, d'où sa dépendance temporelle. Ainsi, pour éviter de peupler les bandes d'énergies supérieures, le temps pour mettre en place le réseau jusqu'à sa profondeur finale, noté τ_{load}, doit respecter le critère d'adiabaticité suivant :

$$\tau_{load} >> \tau_{ad}, \tag{1.76}$$

avec $\tau_{ad} = \hbar/32\sqrt{2}E_r$. Dans le cas du ^{87}Rb, pour un réseau optique de période $\ell = 500$ nm, on a $\tau_{ad} \sim 1.5$ µs. Pour les plus grandes profondeurs de réseaux, le gap énergétique entre les niveaux est plus important, ainsi le terme de droite de l'inégalité (1.76) est plus petit, donc la condition est plus facilement remplie. En revanche, cela n'est plus le cas pour un quasi-moment pris sur les bords de la zone de Brillouin ($q \sim \pm k$), car les énergies des deux bandes

5. Par ailleurs, une des hypothèses qui a mené à ces résultats consistait à linéariser le potentiel au fond d'un site, et ne considérer que la bande fondamentale $n = 0$ dans la dynamique du système. Ceci est vrai tant que l'énergie thermique $k_B T$ et le terme d'interaction U sont petits devant l'écart entre deux niveaux $\hbar\omega$ [Dalibard, 2013]. En effet, si ces conditions ne sont pas remplies, il sera plus favorable pour une des deux particules d'aller dans un niveau supérieur que de "subir" l'effet de répulsion entre ces deux - car cela coûterait plus d'énergie.

sont très proches l'une de l'autre.

• *adiabatique par rapport à la dynamique à N corps* : le nuage est compressé adiabatiquement car les fréquences de piégeage dans certaines directions deviennent plus confinantes, dues au réseau optique. Les atomes vont alors se redistribuer dans le réseau pour maintenir le potentiel chimique constant (état stationnaire). Cette redistribution des atomes se fait par effet tunnel, en un temps $\tau_{NL} \sim \hbar/t$ [Gericke et al., 2007], où t est l'énergie par effet tunnel donnée par (1.69) pour des réseaux profonds. Nous avons vu que cette énergie variait exponentiellement en fonction de la profondeur du réseau, ainsi la condition d'adiabaticité $\tau_{load} > \tau_{NL}$ sera d'autant plus difficile à respecter que la profondeur V_0 du réseau sera grande. Typiquement, pour un atome de ^{87}Rb dans un réseau de profondeur $V_0/E_r = 10$ avec $\ell = 400$ nm, $\tau_{NL} \approx 37$ ms. Expérimentalement, [Gericke et al., 2007] ont montré qu'une rampe d'une durée 100 ms permettait un chargement adiabatique. Par ailleurs, la rampe de chargement ne nécessite par forcément une variation linéaire, elle peut être optimisée avec des techniques de contrôle optimal (*quantum optimal control* en anglais) [Brif et al., 2010; Van Frank et al., 2016].

1.4 Vers des réseaux sub-longueur d'ondes

1.4.1 Energies et dynamique du système

La réalisation des simulateurs quantiques avec des réseaux optiques aux propriétés contrôlables (géométrie, échelle d'énergie, ...) est un excellent outil pour la simulation de problèmes en matière condensée tels que les modèles de Hubbard. Cependant un des inconvénients des systèmes atomiques comparés aux solides est l'échelle des énergies, qui influe également sur l'échelle des temps. Dans le premier cas, l'échelle typique est de l'ordre du nK alors que le second présente des énergies de l'ordre du K. Par exemple, si l'on considère des bosons dans réseau 3D de profondeur $V_0/E_r = 15$ avec $\ell = 500$ nm, d'après nos calculs précédents on trouve $t/k_B \sim 0.3$ nK et $U/k_B \sim 44$ nK. On peut noter que cette profondeur de réseau est proche de la valeur (12-13) pour laquelle la transition de phase superfluide-isolant de Mott a lieu [Greiner et al., 2002].

Par ailleurs, l'étude du magnétisme quantique à l'aide de simulateurs quantiques permet d'introduire une autre échelle d'énergie. Par exemple, pour un mélange de particules à deux composantes (deux spins notés par les états $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$), dans la configuration où les interactions dominent ($U >> t$) on montre que le hamiltonien se réduit à $\mathscr{H} = \pm J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$, où J caractérise l'énergie de ce processus, dit de super-échange ($J \propto t^2/U$), que l'on peut assimiler à un effet tunnel virtuel du second ordre [Trotzky et al., 2008], schématisé sur la Fig.1.11. Le signe du hamiltonien dépend de la nature des particules (+ pour des fermions, - pour des bosons). Cet hamiltonien peut décrire les phases de ferromagnétisme (alignement parallèle des spins entre atomes voisins) et d'anti-ferromagnétisme (alignement anti-parallèle des spins) selon si les particules sont des bosons ou des fermions, respectivement. L'observation de cette transition de phase est un exemple pour la réalisation de simulateurs quantiques dans le but d'observer le magnétisme quantique [Bloch et al., 2012]. Ces interactions de super-échange pourraient par exemple jouer un rôle important dans la supraconductivité à haute température.

A ces échelles d'énergie, il est plus convenable de traiter le refroidissement en terme d'entropie S et non de température. Refroidir une assemblée d'atomes consiste alors à réduire le rapport S/N (entropie par particule). On peut conceptualiser l'entropie comme la tendance du système à migrer vers un état où davantage d'états au sein du système sont accessibles, soit encore, pour reprendre une définition plus connue, vers un état moins ordonné. Ainsi, réduire la température d'un gaz atomique ne signifie pas nécessairement réduire l'entropie S/N [Leanhardt et al., 2003]. C'est une fonction complexe qui dépend de

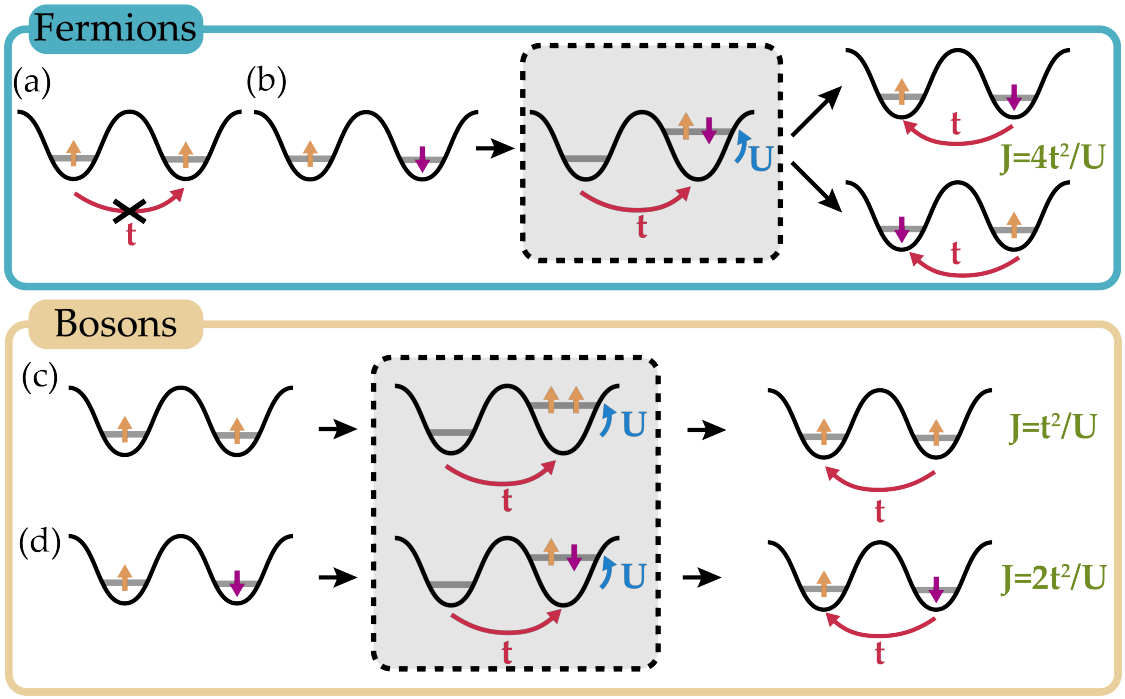


FIGURE 1.11 – **Processus de super-échange.** Pour de larges énergies d'interaction U et dans le cas où l'on a une particule par site, un processus d'interaction du second ordre est possible. On considère des particules avec deux états de spin possibles, notés ↑ (orange) et ↓ (violet). (a) Pour des fermions avec un spin identique, le principe de Pauli exclut toute possibilité d'effet tunnel. (b) En revanche, pour deux états de spin différents, les spins peuvent se redistribuer en passant par un état virtuel (représenté par le rectangle grisé en pointillés) où l'un des spins migre vers un site voisin, par effet tunnel caractérisé par une énergie t (rouge), pour interagir avec la seconde particule avec une énergie U (bleu). Ce processus de super-échange est caractérisé par une énergie $J = 4t^2/U$. Le même processus peut avoir lieu pour des bosons, où l'interaction est caractérisée par une énergie (c) $J = t^2/U$ si les spins sont identiques ou (d) $J = 2t^2/U$ pour des spins différents.

plusieurs paramètres (nombre de particules, température, interactions, ...). Par conséquence pour refroidir davantage (réduire S/N) il est nécessaire d'implémenter de nouvelles techniques de refroidissement.

La phase d'anti-ferromagnétisme est bien connue en physique de la matière condensée. Néanmoins, sa réalisation expérimentale est un défi car elle nécessite d'atteindre des températures extrêmes, avec une entropie par particule bien plus faible que ce qu'il était possible d'atteindre il y a encore quelques années. En effet, si l'on prend l'exemple précédent, on trouve que $J/k_B \sim 7$ pK, soit U >> t >> J. Pour observer cette phase il faut piéger et refroidir des fermions dans un réseau optique profond. Or les méthodes de refroidissement ne sont pas assez efficaces.

Comme nous avons pu le voir dans la section précédente, le chargement d'un condensat dans un réseau optique se fait en allumant adiabatiquement les lasers constituant le réseau. Le terme "adiabatiquement" se traduit en réalité par "en préservant l'entropie S/N". Ainsi, l'entropie minimale que l'on peut atteindre dans un réseau optique correspond à l'entropie minimale dans le piège harmonique avant chargement. Mais les méthodes de refroidissement utilisées (laser et par évaporation) ont une température limite en raison du nombre fini d'atomes qui empêchent d'atteindre une entropie par particule pertinente pour l'exploration de nouveaux régimes. De plus, la mise en place progressive du réseau peut également entraîner des pertes et du chauffage (e.g., l'interaction des atomes avec les photons du réseau [Gordon and Ashkin, 1980]).

Pour atteindre des échelles d'énergie pertinentes pour l'étude de nouveaux régimes (e.g., anti-ferromagnétisme), d'autres techniques sont nécessaires pour réduire l'entropie thermique [McKay and DeMarco, 2011]. Cela peut se faire par filtrage en créant une variation spatiale de l'entropie et extraire les particules dans les régions de haute entropie [Bernier et al., 2009; Capogrosso-Sansone et al., 2008; Ho and Zhou, 2009], en transférant des fermions de haute entropie dans des bandes supérieures pour les retirer [Williams et al., 2010] ou en transférant l'entropie des fluctuations de nombre dans un autre état interne que l'on peut également retirer [Popp et al., 2006]. Une autre méthode pour réduire l'entropie est le refroidissement par immersion [Catani et al., 2009] : on transfère de l'entropie du système dans un réservoir pour ensuite s'affranchir de ce dernier. Dans un mélange à deux composantes, il est également possible d'utiliser la méthode de démagnétisation adiabatique en tirant profit des deux degrés de liberté, introduits par la présence de deux spins, en transférant de l'entropie de l'un dans l'autre [Fattori et al., 2006; Medley et al., 2011].

Un autre problème se pose à ces échelles d'énergie aussi basses : avons-nous les outils nécessaires pour mesurer de si faibles températures (ou entropies) dans un système ? Là encore les techniques développées en thermométrie [McKay and DeMarco, 2011] telles que l'imagerie par temps de vol (analyse de la distribution de l'impulsion), par des mesures *in situ* ou par diffusion de photons ne permettaient pas, il y a encore peu de temps, des mesures poussées de température. Une des méthodes prometteuses était l'utilisation de la diffusion par la lumière. Ainsi, des techniques basées sur la microscopie pour gaz quantique ont émergé pour mesurer les faibles températures de bosons [Bakr et al., 2009; Sherson et al., 2010] puis de fermions [Cheuk et al., 2015; Haller et al., 2015]. Les microscopes pour gaz quantiques utilisent une méthode de détection à haute résolution qui permet de résoudre les sites du réseau individuellement, par fluorescence des atomes.

Avec ces nouvelles méthodes d'imagerie, des modèles de magnétisme quantique ont ainsi pu être simulés pour des bosons, comme par exemple le modèle de Ising [Simon et al., 2011] ou le modèle de Heisenberg [Trotzky et al., 2008] ; et pour des fermions tels que la phase d'isolant de Mott [Jördens et al., 2008; Schneider et al., 2008] ainsi que le régime d'anti-ferromagnétisme récemment [Greif et al., 2016; Mazurenko et al., 2017]. Cette dernière expérience utilise par ailleurs la méthode d'immersion (mentionnée plus haut) avec laquelle l'entropie est redistribuée à l'aide d'un réservoir.

Cependant un autre problème découle de ces échelles d'énergie si l'on considère par exemple un mélange de particules à deux spins : la dynamique du système [Brown et al., 2015]. En effet, dans le réseau la relaxation de deux spins se fait *via* un échange virtuel entre sites, défini par une énergie J. Or la dynamique de ce phénomène est de l'ordre de $h/\mathrm{J} \sim 7$ s si l'on reprend les valeurs précédentes. Ces longs temps de thermalisation limitent alors la réalisation expérimentale. Il apparaît alors naturel, comme possibilité pour augmenter la dynamique du système, de réduire les dimensions caractéristiques du système, *i.e.*, la période du réseau.

1.4.2 Réduction de la période du réseau

D'après les expressions des énergies tunnel (1.69) et d'interaction (1.72), réduire la période ℓ permet d'augmenter les énergies au sein du réseau de plusieurs ordres de grandeur, comme le montre la Fig.1.12. Cela a pour conséquence de réduire les besoins dans le refroidissement des atomes dans le réseau, car les régimes pertinents sont plus facilement accessibles.

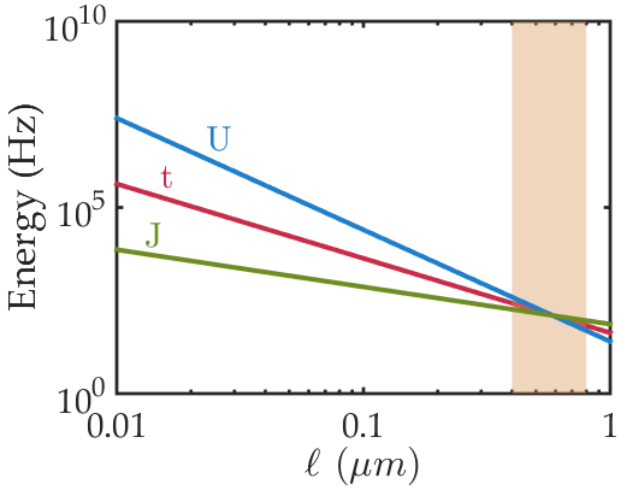


FIGURE 1.12 – **Échelles d'énergie dans un réseau optique en fonction de la période.** Évolution des énergies d'interaction U (bleu), tunnel t (rouge) et de super-échange J (vert) en fonction de la période ℓ du réseau optique. La zone orangée correspond au champ lointain (espace libre) où $\ell \sim \lambda/2$, méthode communément employée pour la génération de potentiels périodiques. Diminuer la période permet de gagner plusieurs ordres de grandeurs sur les énergies mises en jeu au sein du système.

Communément les réseaux optiques sont réalisés en champ lointain (zone orangée sur la Fig.1.12) avec une période minimale donnée par $\ell_{min} \sim \lambda/2$. Quelques approches, toujours en champ lointain, ont été proposées pour générer des réseaux sublongueur d'ondes utilisant les transitions optiques à multi-photons [Dubetsky and Berman, 2002; Ritt et al., 2006] et les modulations temporelles périodiques [Nascimbene et al., 2015]. Pour aller au-delà de la limite de diffraction et réduire ℓ, il est possible de placer les atomes en champ proche d'un système nanophysique, et de tirer profit des Plasmons Polaritons de Surface (SPPs pour *Surface Plasmon Polaritons* en anglais). Ces derniers sont des oscillations d'électrons libres à une interface métal/diélectrique et dont le mouvement génère des champ électromagnétiques évanescents (voir Chapitre 3). Ainsi des propositions ont été faites pour piéger des atomes en champ proche d'une nanostructure [Chang et al., 2009] et réaliser des réseaux optiques sublongueur d'onde où la résonance plasmonique d'un réseau de nanoparticules d'argent est utilisée pour créer des potentiels optiques, pouvant mener à $\ell \simeq 60$nm [Gullans et al., 2012]. Un des avantages des SPPs est le contrôle qu'ils pourraient offrir *via* leur couplage

avec les atomes [Stehle et al., 2011, 2014], par exemple permettre des interactions à longues portées entre les atomes du réseau [Gullans et al., 2012].

Il existe d'autres propositions pour réaliser des potentiels sublongueur d'onde tels que les systèmes supraconducteurs avec la génération d'un réseau magnétique par la création de vortex dans un matériau supraconducteur, où ℓ serait de l'ordre de quelques dizaines de nm [Romero-Isart et al., 2013] ou encore les systèmes photoniques où un réseau optique est généré par les forces dipolaires-électriques dues aux modes guidés d'un cristal photonique et ainsi modulé tel que $\ell_{min} = \lambda/2n$, où n est l'indice de réfraction du matériau [González-Tudela et al., 2015]. Dans ce dernier article, les auteurs proposent également la possibilité d'aller en dessous de ℓ_{min} en piégeant les atomes à l'aide des forces du vide (voir Chapitre 4 pour une description approfondie) pour la modulation longitudinale, pouvant donner des périodes ℓ de quelques dizaines de nm. Une autre méthode proposée dans [Chang et al., 2014] consiste à utiliser un matériau de Drude décrit par une fréquence plasma ω_p, un facteur de qualité Q=10^7 et une fréquence plasmon $\omega_{pl} = \omega_p/\sqrt{2}$ accordé sur la transition atomique. Ces conditions sont expérimentalement très strictes sur la conception du matériau. La fréquence plasma des métaux à haute conductivité se situe dans l'ultraviolet extrême (<150 nm) avec un facteur de qualité en-deçà de 10^3 [Ordal et al., 1985]. En outre dans certaines méthodes telles que celle présentée dans [Gullans et al., 2012], les fluctuations thermiques des électrons libres dans le métal peuvent induire de la décohérence (par retournement de spin) sur les atomes piégés à proximité des nanoparticules.

Par ailleurs, piéger des atomes en champ proche d'une nanostructure est un défi expérimental. En effet, ces fluctuations quantiques du vide, mentionnées en fin de paragraphe précédent, engendrent une force entre l'atome et la structure, c'est l'effet Casimir-Polder (CP) [Casimir and Polder, 1948], que nous détaillerons dans le Chapitre 4. Cette force, souvent attractive, entraîne la perte des atomes, qui sont attirés par la surface. Par conséquent, piéger des atomes en champ proche de nanostructure requiert souvent des intensités conséquentes. Dans certaines propositions théoriques mentionnées ci-dessus telle que [González-Tudela et al., 2015], les intensités utilisées pourraient notamment endommager la surface et par conséquent nuire au piégeage des atomes.

Une autre difficulté pouvant apparaître dans certaines de ces méthodes est la capacité à transporter les atomes à la position du piège. Dans notre équipe des simulations ont été réalisées en tirant profit des franges d'interférences créées par un faisceau à 1064 nm rétroréfléchi sur une surface en or. En pivotant la structure, la distance entre les atomes piégés dans une frange et la surface est ainsi réduite, permettant de transporter les atomes en champ proche de la nanostructure [Busquet, 2017]. Le piégeage sublongueur d'onde est ensuite réalisé à l'aide de la méthode que nous allons maintenant aborder.

1.4.3 Vers une nouvelle méthode de piégeage en champ proche

Un des objectifs de ma thèse était d'implémenter une nouvelle méthode permettant de piéger et manipuler des atomes à quelques dizaines de nm d'une surface. Pour cela, l'idée était de structurer un potentiel sublongueur d'onde en combinant deux effets mentionnés précédemment : la résonance plasmonique et l'effet CP. Cette méthode s'inspire de [Chang et al., 2014; González-Tudela et al., 2015] où les auteurs tirent profit des caractéristiques du matériau et de la modification des forces du vide pour contrôler les propriétés atomiques.

Le développement de notre méthode est guidé par la faisabilité expérimentale. Nous développerons plus en détail la méthode et les calculs correspondants dans les Chapitres 3, 4 et 5. Celle-ci est schématisée en Fig.1.13. En voici brièvement le principe :

• En présence d'une surface les états internes de l'atome sont modifiés par les fluctuations quantiques (Fig.1.13(a)).

• Un premier laser hors-résonance est utilisé pour modifier les propriétés de l'état excité, à l'aide d'une résonance plasmonique (Fig.1.13(b))

• Un second laser est réglé autour de la résonance de la transition atomique de sorte à être résonant à une position z_b pour permettre un couplage entre les deux états fondamental et excité (Fig.1.13(c)). Il en résulte un potentiel total (en noir sur le schéma) permettant de piéger les atomes proche de la surface.

• Enfin, pour créer un réseau à une ou deux dimension(s) il est possible de nano-structurer la surface pour moduler les forces du vide (Fig.1.13(d)). En effet, l'interaction entre l'atome et la surface est plus importante au-dessus d'un pilier qu'entre deux piliers.

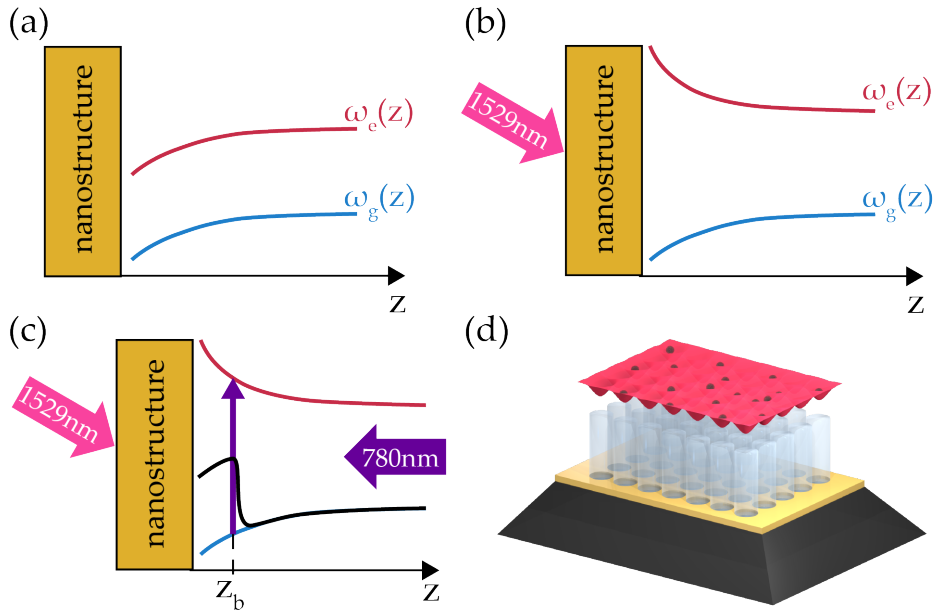


FIGURE 1.13 – **Méthode de piégeage sublongueur d'onde.** Principe de notre méthode de piégeage : (a) en champ proche d'une nanostructure les énergies des niveaux fondamental $\omega_g(z)$ (bleu) et excité $\omega_g(z)$ (rouge) sont modifiés en raison de l'effet CP. (b) Un laser à 1529 nm (rose) est utilisé pour exciter une résonance plasmonique qui génère un champ évanescent s'imprimant sur l'état excité *via* l'effet Stark. (c) Un second laser à 780 nm (violet) désaccordé de la résonance atomique d'une quantité $\Delta(z)$ permet de coupler les deux états atomiques et crée, de par sa dépendance spatiale, une barrière de potentiel (noir) à la position z_b satisfaisant $\Delta(z_b) = 0$. (d) La surface peut être structurée périodiquement (à l'aide de piliers diélectriques ici) afin de moduler les forces du vide, résultant en un réseau à deux dimensions dans lequel les atomes sont piégés.

Cette méthode offre un grand contrôle des paramètres de piégeage (géométrie, temps de vie, etc...). En effet, les différents paramètres expérimentaux tels que les intensités ou les fréquences des lasers permettent de modifier ces propriétés de piégeage. Le développement théorique de cette méthode qui est au cœur de mon travail de thèse sera détaillé dans les Chapitres 3, 4 et 5.

1.5 Summary

In this chapter we explained the Bose-Einstein condensation which describes the moment when the atoms are cooled down near absolute zero and starts to behave as they were a single particle. First, by considering an ideal gas (no interactions) we showed that the number of atoms in the excited state was limited by the boundary (1.13). We expressed the critical temperature T_c, given by (1.14), which is defined as the temperature at which the atoms start to reach the same energy state, *i.e.*, to condensate. In Fig.1.2 we plotted the thermal and condensate column densities of a BEC. This double-structure profile is one of the

different signatures of the observation of a BEC. We also introduced the Gross-Pitaevskii equation (1.23) which describes the particles' behaviors within a dilute gas. We presented the Thomas-Fermi approximation which takes into account the repulsive interactions within the gas when the number of atom N is large, corresponding to our experimental conditions.

In section 1.2, we showed that the energy states of an atom in a inhomogeneous field, with a Rabi frequency Ω and detuned from the atomic transition by an amount δ, were shifted by a quantity $\Delta E_g \propto |\Omega|^2/\delta$. This energy shift is also called the AC Stark effect. Consequently the atom experiences a dipole force that derives from the spatial gradient of this light shift. This force is commonly used to trap atom by creating optical lattices. As we reported, the latter are formed by making lasers interfere (cf. Fig.1.5). We studied the energies in the lattice by using the Bloch theorem to calculate the modes within the lattice. We introduced the Wannier functions which are used to describe atoms in the different sites in deep lattices. We used these functions to calculate the tunnel energy t and interaction energy U that describe the possibility for an atom to go from one site to another by tunneling effect and the interaction between two atoms in one site, respectively. Going from the regime where the atoms couple each other between neighboring lattice sites ($t >>$ U) to the regime where each atom is localized to one site ($t <<$ U) allows one to observe the superfluid-Mott insulator phase transition. We also discussed the timescales when loading a condensate into a lattice. In particular one has to be careful not to transfer a part of the population towards higher energy states by respecting the adiabaticity condition (1.76) and also loading BECs with ramp duration greater than the many-body dynamics ($\sim \hbar/t$) inside the lattice.

Finally we addressed the energy scales in lattices. Especially we defined the notion of entropy per particle S/N which is used to characterize a cold atomic sample. We mentioned different techniques for lowering S/N and consequently cool down the atoms in order to adiabatically transfer them in lattices. At such low energy scales, the dynamics can be quite long compared to experimental sequences. To speed up the dynamics, a possible solution is to reduce the dimensions of the lattice to speed up the dynamics. In Fig.1.12 we plotted the different energy scales in a cubic lattice which increase by four orders of magnitude while reducing the lattice period ℓ by two orders. We mentioned various methods for going beyond the current limit $\ell \sim \lambda/2$ reached using the interferences of laser light in far field with wavelength λ (common approach). In particular we listed some methods that use advantages of near-field properties (e.g., surface plasmons generated at dielectric/metal interfaces or vacuum forces). Trapping atoms in the near field of nanostructures is quite experimentally challenging. One major effect arises from quantum vacuum fluctuations which generate an attractive force between a ground-state atom and a dielectric or metallic structure, known as Casimir-Polder effect. Thus, generating traps close to a nanostructure often requires large intensities that could damage the surface. Moreover, one has to implement a way of transporting the atoms very close to the structure before trapping them.

In this context, we developed a method for trapping atoms in subwavelength potentials inspired from [Chang et al., 2014; González-Tudela et al., 2015]. The scheme was presented in Fig.1.13. The idea is to combine the advantages of plasmonic resonance and vacuum forces. First a laser is used to excite surface plasmons at the interface medial/dielectric which generate an evanescent electric field. The latter will interact with the atomic dipole by AC Stark shift. The laser frequency is tuned to mainly shift the excited state of the ^{87}Rb so that the evanescent profile imprints the atomic state. Then a second laser is used to couple the ground and excited states in order to create a spatially-varying detuning. The laser is thus resonant at only one position resulting in a barrier of potential and preventing the atom from crashing into the surface. The generation of a periodic potential is realized by structuring the surface in one dimension. The corresponding vacuum force is consequently larger in front of a ridge of the grating than in front of a groove. It results in a periodic potential with a lattice spacing equal to the grating period. The method was mainly guided by experimental feasibility.

Références

Abramowitz, M. and Stegun, I. A. (1970). *Handbook of mathematical functions : with formulas, graphs, and mathematical tables*. Dover Publications. 16

Bagnato, V. and Kleppner, D. (1991). Bose-Einstein condensation in low-dimensional traps. *Physical Review A*, 44. 17

Bakr, W. S., Gillen, J. I., Peng, A., Fölling, S., and Greiner, M. (2009). A quantum gas microscope for detecting single atoms in a Hubbard-regime optical lattice. *Nature*, 462. 34

Ben Dahan, M., Peik, E., Reichel, J., Castin, Y., and Salomon, C. (1996). Bloch Oscillations of Atoms in an Optical Potential. *Physical Review Letters*, 76. 31

Bernier, J.-S., Kollath, C., Georges, A., De Leo, L., Gerbier, F., Salomon, C., and Köhl, M. (2009). Cooling fermionic atoms in optical lattices by shaping the confinement. *Physical Review A*, 79. 34

Bloch, I. (2005). Ultracold quantum gases in optical lattices. *Nature Physics*, 1. 20

Bloch, I., Dalibard, J., and Nascimbène, S. (2012). Quantum simulations with ultracold quantum gases. *Nature Physics*, 8. 32

Bloch, I., Dalibard, J., and Zwerger, W. (2008). Many-body physics with ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, 80. 20

Bogoliubov, N. (1947). On the theory of superfluidity. *Journal of Physics*, 11. 19

Bose, V. (1924). Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik*, 26. 13

Brif, C., Chakrabarti, R., and Rabitz, H. (2010). Control of quantum phenomena : past, present and future. *New Journal of Physics New Journal of Physics New Journal of Physics*, 12(12). 32

Brown, R. C., Wyllie, R., Koller, S. B., Goldschmidt, E. A., Foss-Feig, M., and Porto, J. V. (2015). Two-dimensional superexchange-mediated magnetization dynamics in an optical lattice. *Science*, 348. 35

Busquet, C. (2017). *Développement d'un système d'imagerie superrésolue d'un gaz d'atomes ultrafroids piégés dans des réseaux*. PhD thesis, Université de Bordeaux. 36

Capogrosso-Sansone, B., Söyler, e. G., Prokof'ev, N., and Svistunov, B. (2008). Monte Carlo study of the two-dimensional Bose-Hubbard model. *Physical Review A*, 77. 34

Casimir, H. B. G. and Polder, D. (1948). The Influence of Retardation on the London-van der Waals Forces. *Physical Review*, 73. 36

Catani, J., Barontini, G., Lamporesi, G., Rabatti, F., Thalhammer, G., Minardi, F., Stringari, S., and Inguscio, M. (2009). Entropy Exchange in a Mixture of Ultracold Atoms. *Physical Review Letters*, 103. 34

Chang, D. E., Sinha, K., Taylor, J. M., and Kimble, H. J. (2014). Trapping atoms using nanoscale quantum vacuum forces. *Nature Communications*, 5. 36, 38

Chang, D. E., Thompson, J. D., Park, H., Vuletić, V., Zibrov, A. S., Zoller, P., and Lukin, M. D. (2009). Trapping and Manipulation of Isolated Atoms Using Nanoscale Plasmonic Structures. *Physical Review Letters*, 103. 35

Cheuk, L. W., Nichols, M. A., Okan, M., Gersdorf, T., Ramasesh, V. V., Bakr, W. S., Lompe, T., and Zwierlein, M. W. (2015). Quantum-Gas Microscope for Fermionic Atoms. *Physical Review Letters*, 114. 34

Chin, C., Grimm, R., Julienne, P., and Tiesinga, E. (2010). Feshbach resonances in ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, 82. 20

Chomaz, L., Corman, L., Bienaimé, T., Desbuquois, R., Weitenberg, C., Nascimbène, S., Beugnon, J., and Dalibard, J. (2015). Emergence of coherence via transverse condensation in a uniform quasi-two-dimensional Bose gas. *Nature Communications*, 6(1) :6162. 18

Cohen-Tannoudji, C. (1998). Leçons du Collège de France, Cours 5. 18

Cohen-Tannoudji, C., Dupont-Roc, J., and Grynberg, G. (1996). *Processus d'interaction entre photons et atomes*. Edp sciences edition. 21

Dalfovo, F., Giorgini, S., Pitaevskii, L. P., and Stringari, S. (1999). Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. *Reviews of Modern Physics*, 71. 16, 19, 20, 27

Dalibard, J. (2013). Leçons du Collège de France, Chaire Atomes et Rayonnement, Cours "Réseaux optiques dans le régime des liaisons fortes". 31

Dalibard, J. (2016). Leçons du Collège de France, Chaire Atomes et Rayonnement, Cours "Statistique de Bose-Einstein et condensation". 17

Dubetsky, B. and Berman, P. R. (2002). λ / 8 -period optical potentials. *Physical Review A*, 66. 35

Einstein, A. (1924). Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. *Sitzungsberi./Phys. Kl., Preuss. Akad.der Wiss.*, 22. 13, 15

Fattori, M., Koch, T., Goetz, S., Griesmaier, A., Hensler, S., Stuhler, J., and Pfau, T. (2006). Demagnetization cooling of a gas. *Nature Physics*, 2. 34

Fisher, M. P. A., Weichman, P. B., Grinstein, G., and Fisher, D. S. (1989). Boson localization and the superfluid-insulator transition. *Phys. Rev. B*, 40. 31

Gaunt, A. L., Schmidutz, T. F., Gotlibovych, I., Smith, R. P., and Hadzibabic, Z. (2013). Bose-Einstein Condensation of Atoms in a Uniform Potential. *Physical Review Letters*, 110. 15

Gericke, T., Gerbier, F., Widera, A., Fölling, S., Mandel, O., and Bloch, I. (2007). Adiabatic loading of a Bose–Einstein condensate in a 3D optical lattice. *Journal of Modern Optics*, 54. 32

González-Tudela, A., Hung, C.-L., Chang, D. E., Cirac, J. I., and Kimble, H. J. (2015). Subwavelength vacuum lattices and atom–atom interactions in two-dimensional photonic crystals. *Nature Photonics*, 9. 36, 38

Gordon, J. P. and Ashkin, A. (1980). Motion of atoms in a radiation trap. *Physical Review A*, 21. 34

Greif, D., Parsons, M. F., Mazurenko, A., Chiu, C. S., Blatt, S., Huber, F., Ji, G., and Greiner, M. (2016). Site-resolved imaging of a fermionic Mott insulator. *Science*, 351. 34

Greiner, M., Mandel, O., Rom, T., Altmeyer, A., Widera, A., Hänsch, T., and Bloch, I. (2002). Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in an ultracold gas of atoms. *Nature*, 415. 31, 32

Grimm, R., Weidemüller, M., and Ovchinnikov, Y. B. (2000). Optical Dipole Traps for Neutral Atoms. *Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 42. 22

Gross, E. P. (1961). Structure of a quantized vortex in boson systems. *Il Nuovo Cimento*, 20. 18

Gullans, M., Tiecke, T. G., Chang, D. E., Feist, J., Thompson, J. D., Cirac, J. I., Zoller, P., and Lukin, M. D. (2012). Nanoplasmonic Lattices for Ultracold Atoms. *Physical Review Letters*, 109. 35, 36

Haller, E., Hudson, J., Kelly, A., Cotta, D. A., Peaudecerf, B., Bruce, G. D., and Kuhr, S. (2015). Single-atom imaging of fermions in a quantum-gas microscope. *Nature Physics*, 11. 34

Ho, T.-L. and Zhou, Q. (2009). Universal Cooling Scheme for Quantum Simulation. 34

Jaksch, D., Bruder, C., Cirac, J. I., Gardiner, C. W., and Zoller, P. (1998). Cold bosonic atoms in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 81. 31

Jaksch, D. and Zoller, P. (2005). The cold atom Hubbard toolbox. *Annals of Physics*, 315. 29

Jördens, R., Strohmaier, N., Günter, K., Moritz, H., and Esslinger, T. (2008). A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice. *Nature*, 455. 34

Leanhardt, A. E., Pasquini, T. A., Saba, M., Schirotzek, A., Shin, Y., Kielpinski, D., Pritchard, D. E., and Ketterle, W. (2003). Cooling Bose-Einstein Condensates Below 500 Picokelvin. *Science*, 301. 32

Mazurenko, A., Chiu, C. S., Ji, G., Parsons, M. F., Kanász-Nagy, M., Schmidt, R., Grusdt, F., Demler, E., Greif, D., and Greiner, M. (2017). A cold-atom Fermi–Hubbard antiferromagnet. *Nature*, 545. 34

McKay, D. C. and DeMarco, B. (2011). Cooling in strongly correlated optical lattices : prospects and challenges. *Reports on Progress in Physics*, 74. 34

Medley, P., Weld, D. M., Miyake, H., Pritchard, D. E., and Ketterle, W. (2011). Spin Gradient Demagnetization Cooling of Ultracold Atoms. *Physical Review Letters*, 106. 34

Metcalf, H. J. and van der Straten, P. (2003). Laser cooling and trapping of atoms. *Journal of the Optical Society of America B*, 20. 22

Nascimbene, S., Goldman, N., Cooper, N. R., and Dalibard, J. (2015). Dynamic Optical Lattices of Subwavelength Spacing for Ultracold Atoms. *Physical Review Letters*, 115. 35

Neil W. Ashcroft, N. D. M. (1976). *Solid State Physics*. Brooks cole edition. 24

Ordal, M. A., Bell, R. J., Alexander, R. W., Long, L. L., and Querry, M. R. (1985). Optical properties of fourteen metals in the infrared and far infrared : Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Mo, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, V, and W. *Applied Optics*, 24(24) :4493. 36

Pethick, C. and Smith, H. (2008). *Bose-Einstein condensation in dilute gases*. Cambridge University Press. 18, 27

Pitaevskii, L. P. (1961). Vortes lines in an imperfect Bose gas. *J. Exptl. Theoret. Phys. (U.S.S.R.)*, 13. 18

Popp, M., Garcia-Ripoll, J.-J., Vollbrecht, K. G. H., and Cirac, J. I. (2006). Cooling toolbox for atoms in optical lattices. *New Journal of Physics*, 8. 34

Ritt, G., Geckeler, C., Salger, T., Cennini, G., and Weitz, M. (2006). Fourier synthesis of optical potentials for atomic quantum gases. *Physical Review A*, 74. 35

Romero-Isart, O., Navau, C., Sanchez, A., Zoller, P., and Cirac, J. I. (2013). Superconducting Vortex Lattices for Ultracold Atoms. *Physical Review Letters*, 111. 36

Schneider, U., Hackermüller, L., Will, S., Best, T., Bloch, I., Costi, T. A., Helmes, R. W., Rasch, D., and Rosch, A. (2008). Metallic and insulating phases of repulsively interacting fermions in a 3D optical lattice. *Science*, 322. 34

Sherson, J. F., Weitenberg, C., Endres, M., Cheneau, M., Bloch, I., and Kuhr, S. (2010). Single-atom-resolved fluorescence imaging of an atomic Mott insulator. *Nature*, 467. 34

Simon, J., Bakr, W. S., Ma, R., Tai, M. E., Preiss, P. M., and Greiner, M. (2011). Quantum simulation of antiferromagnetic spin chains in an optical lattice. *Nature*, 472. 34

Stehle, C., Bender, H., Zimmermann, C., Kern, D., Fleischer, M., and Slama, S. (2011). Plasmonically tailored micropotentials for ultracold atoms. *Nature Photonics*, 5. 36

Stehle, C., Zimmermann, C., and Slama, S. (2014). Cooperative coupling of ultracold atoms and surface plasmons. *Nature Physics*, 10. 36

Tammuz, N., Smith, R. P., Campbell, R. L. D., Beattie, S., Moulder, S., Dalibard, J., and Hadzibabic, Z. (2011). Can a Bose Gas Be Saturated ? *Physical Review Letters*, 106. 15

Trotzky, S., Cheinet, P., Fölling, S., Feld, M., Schnorrberger, U., Rey, A. M., Polkovnikov, A., Demler, E. A., Lukin, M. D., and Bloch, I. (2008). Time-resolved observation and control of superexchange interactions with ultracold atoms in optical lattices. *Science*, 319. 32, 34

Van Frank, S., Bonneau, M., Schmiedmayer, J., Hild, S., Gross, C., Cheneau, M., Bloch, I., Pichler, T., Negretti, A., Calarco, T., and Montangero, S. (2016). Optimal control of complex atomic quantum systems. 32

Wannier, G. H. (1937). The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals. *Physical Review*, 52. 26

Williams, J. R., Huckans, J. H., Stites, R. W., Hazlett, E. L., and O'Hara, K. M. (2010). Preparing a highly degenerate Fermi gas in an optical lattice. *Physical Review A*, 82. 34

Chapitre 2

Refroidissement d'atomes jusqu'au régime de dégénérescence quantique

« Insanity : doing the same thing over and over again and expecting different results. »

Albert Einstein

Sommaire

2.1 Dispositif expérimental 44
2.1.1 Espèce atomique 44
2.1.2 Banc optique à 780 nm 45
2.1.3 Système de détection 47
2.1.4 Limites expérimentales 49
2.2 Etapes de refroidissement expérimentales 51
2.2.1 Piège Magnéto-Optique 2D et 3D 51
2.2.2 MOT comprimé 56
2.2.3 Mélasse optique 57
2.2.4 Refroidissement par évaporation dans un piège magnétique 58
2.2.5 Piège hybride 60
2.2.6 Résumé de la séquence 66
2.3 Condensat de Bose-Einstein : caractérisation expérimentale 68
2.3.1 Augmentation de la densité optique 69
2.3.2 Double structure 69
2.3.3 Estimation de la température du nuage 69
2.3.4 Estimation du temps de vie 72
2.4 Calibration du nombre d'atomes 73
2.4.1 Effets de saturation sur le nuage atomique 74
2.4.2 Loi de Beer-Lambert 74
2.5 Conclusions et perspectives 80
2.6 Summary 81

Dans ce chapitre nous présenterons la séquence de refroidissement mise en place au sein du laboratoire. Elle combine plusieurs étapes successives de façon à réduire la température des atomes tout en minimisant les pertes, inévitables pour la thermalisation du gaz. Toutes ces étapes seront ici détaillées avec les résultats correspondants. Cette séquence expérimentale nous aura permis d'atteindre le régime de dégénérescence quantique en une quinzaine

de secondes. Nous caractériserons ainsi le BEC en présentant certains signes validant son obtention ainsi qu'une estimation du temps de vie. Enfin nous présenterons une mesure d'imagerie par absorption à forte saturation afin de calibrer le nombre d'atomes au sein du nuage de manière absolue.

2.1 Dispositif expérimental

2.1.1 Espèce atomique

Le refroidissement par laser impose une certaine condition sur le choix des atomes. En effet, il se limite à ceux dont la transition atomique servant au refroidissement possède une longueur d'onde correspondant aux lasers disponibles dans le commerce. Par ailleurs il est nécessaire que l'atome possède une transition cyclante adressable par laser. Parmi les principaux candidats, les alcalins et alcalino-terreux sont les plus adaptés. En effet, leurs transitions atomiques sont à des longueurs d'onde (visible-infrarouge) dont les outils technologiques (lasers) sont facilement disponibles. De plus les lasers fibrés à 1560 nm pour les télécommunications, également bien développés et d'une grande stabilité, peuvent être utilisés après doublage en fréquence pour certaines espèces comme le rubidium ou le potassium.

L'espèce atomique que nous refroidissons est le ^{87}Rb, espèce avec laquelle le premier BEC a été obtenu [Anderson et al., 1995]. Le ^{87}Rb est très bien refroidi, notamment en raison de sa grande section efficace qui favorise les collisions élastiques (la longueur de diffusion vaut $a_s \sim 100 a_0$, avec le rayon de Bohr $a_0 = 0.5$ Å), ce qui, comme nous le verrons dans la suite, est avantageux pour le refroidissement par évaporation. Par ailleurs les niveaux hyperfins du rubidium 87 peuvent être résolus spectralement, ce qui permet d'asservir les lasers aisément et d'obtenir un refroidissement doppler et sub-doppler efficace. Nous travaillons ainsi sur la transition D2 à 780.241 nm, plus exactement sur les niveaux hyperfins des états $5S_{1/2}$ et $5P_{3/2}$, dont la structure est schématisée en Fig.2.1. Le laser refroidisseur (C pour *cooling*)

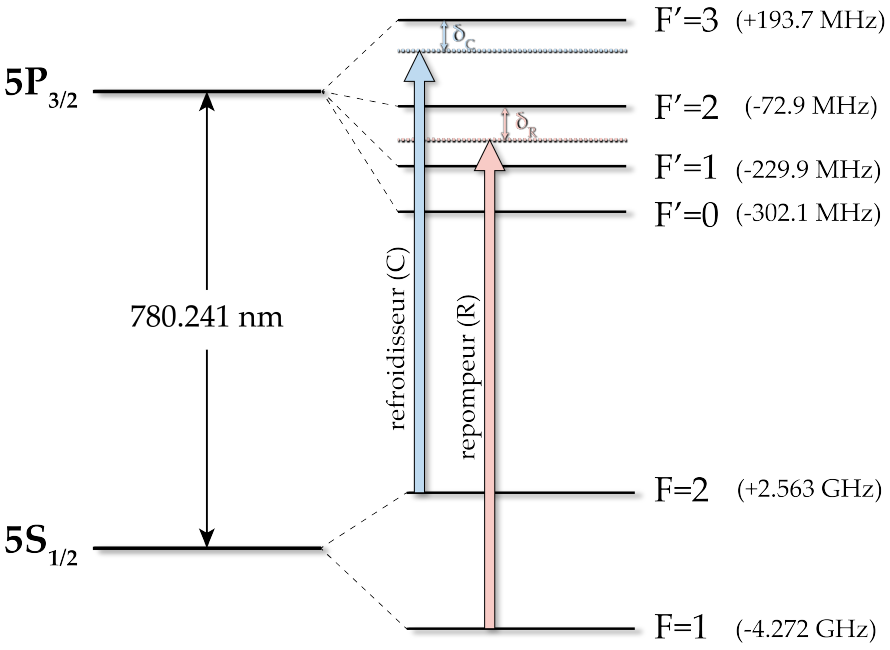


FIGURE 2.1 – **Structure hyperfine des niveaux $5S_{1/2}$ et $5P_{3/2}$ du ^{87}Rb**, inspirée de [Steck, 2001]. Structure hyperfine des niveaux $5S_{1/2}$ et $5P_{3/2}$ de la transition D2 (780.241 nm) du ^{87}Rb. La transition cyclante entre les niveaux hyperfins $F = 2$ et $F' = 3$ est utilisée pour le refroidissement/imagerie (C pour *Cooling*) et la transition entre les états $F = 1$ et $F' = 2$ correspond à la fréquence du repompeur (R) dont les désaccords respectifs δ_C et δ_R seront variés tout au long de la séquence expérimentale. Les décalages fréquentiels des niveaux hyperfins sont donnés entre parenthèses.

est accordé sur la transition cyclante $|5S_{1/2}, F = 2\rangle \rightarrow |5P_{3/2}, F' = 3\rangle$ et permet, comme son nom l'indique, de refroidir les atomes en variant son désaccord δ_C, mais également d'imager le nuage atomique. Le désaccord est modifié selon la densité des nuages à imager. Pour repomper les atomes de l'état noir $F = 1$ (*i.e.*, pour le pompage optique) nous utilisons un laser repompeur (R) désaccordé d'une quantité δ_R de la transition $|5S_{1/2}, F = 1\rangle \rightarrow |5P_{3/2}, F' = 2\rangle$.

A long terme, l'expérience a pour but de refroidir un mélange de ^{87}Rb (bosons) et de ^{40}K (fermions), or les caractéristiques (e.g., les fréquences) du potassium sont très proches de celles du Rb (voir la structure atomique du ^{40}K en Annexe A, Fig.A.2) ainsi les outils expérimentaux pourront se transposer d'une espèce à l'autre.

2.1.2 Banc optique à 780 nm

Nous présenterons ici succinctement le dispositif expérimental, pour de plus de détails le lecteur pourra se référer aux thèses précédentes de l'expérience : [Busquet, 2017; Vasquez Bullon, 2016].

Les lasers utilisés pour refroidir ou repomper les atomes proviennent d'un même et seul système laser développé par l'entreprise Muquans, dont l'architecture est basée sur la technologie des télécommunications (à 1560 nm). Ce système est ainsi doté d'une grande stabilité, d'une faible largeur spectrale (~ 10 kHz) et d'une puissance en sortie suffisante pour notre expérience. Ainsi après doublage de fréquence, il nous fournit trois faisceaux lasers de longueur d'onde 780 nm : un laser "maître" et deux lasers "esclaves".

Les trois lasers (Maître, Esclaves 1 et 2) sont acheminés par fibre optique jusqu'au banc optique qui va permettre de séparer et combiner les différents faisceaux utilisés pour l'expérience (refroidissement, pompage optique, imagerie), dont le schéma est présenté en Fig.2.2. Les lasers de l'expérience doivent être contrôlés (en puissance et fréquence) avec des temps courts (~ µs). Pour cela nous utilisons des Modulateurs Acousto-Optiques (AOM) dont le fonctionnement utilise l'effet acousto-optique : une onde lumineuse de fréquence ω est diffractée par une onde de pression de fréquence Ω (dans la direction perpenticulaire), l'onde électromagnétique en sortie possède alors une fréquence $\omega + n\Omega$, n étant l'ordre de diffraction. La quantité de lumière de chaque ordre n est contrôlée *via* l'intensité de l'onde acoustique. Dans notre expérience, les lasers sont alignés sur le premier ordre de diffraction. Les temps de réponse des AOMs sont limités par le temps de transit de l'onde sonore (typiquement quelques dizaines de ns). Des obturateurs mécaniques (*shutters*) sont également utilisés pour supprimer toute lumière parasite et éviter une injection non-désirée dans les fibres optiques. L'action mécanique requise pour les fermer engendre des temps de réponse plus longs (de l'ordre de la ms).

Un bilan de puissances est présenté dans le Tableau 2.1 où nous donnons la puissance en sortie de fibre (après injection sur le banc optique en Fig.2.2). Les faisceaux refroidisseur (C) et repompeur (R) sont également répartis sur trois paires de collimateurs à l'aide d'un diviseur fibré de la compagnie Schäfter+Kirchhoff. Les mesures de la puissance en sortie de chaque collimateur après répartition sont également présentées.

faisceau	**puissance en sortie** (mW)	**puissance par collimateur** (mW)
MOT2D C	180	90
MOT2D R	22	11
MOT3D C	136	16
MOT3D R	26	1.5

TABLEAU 2.1 – **Bilan des puissances en sortie des fibres et des collimateurs.**

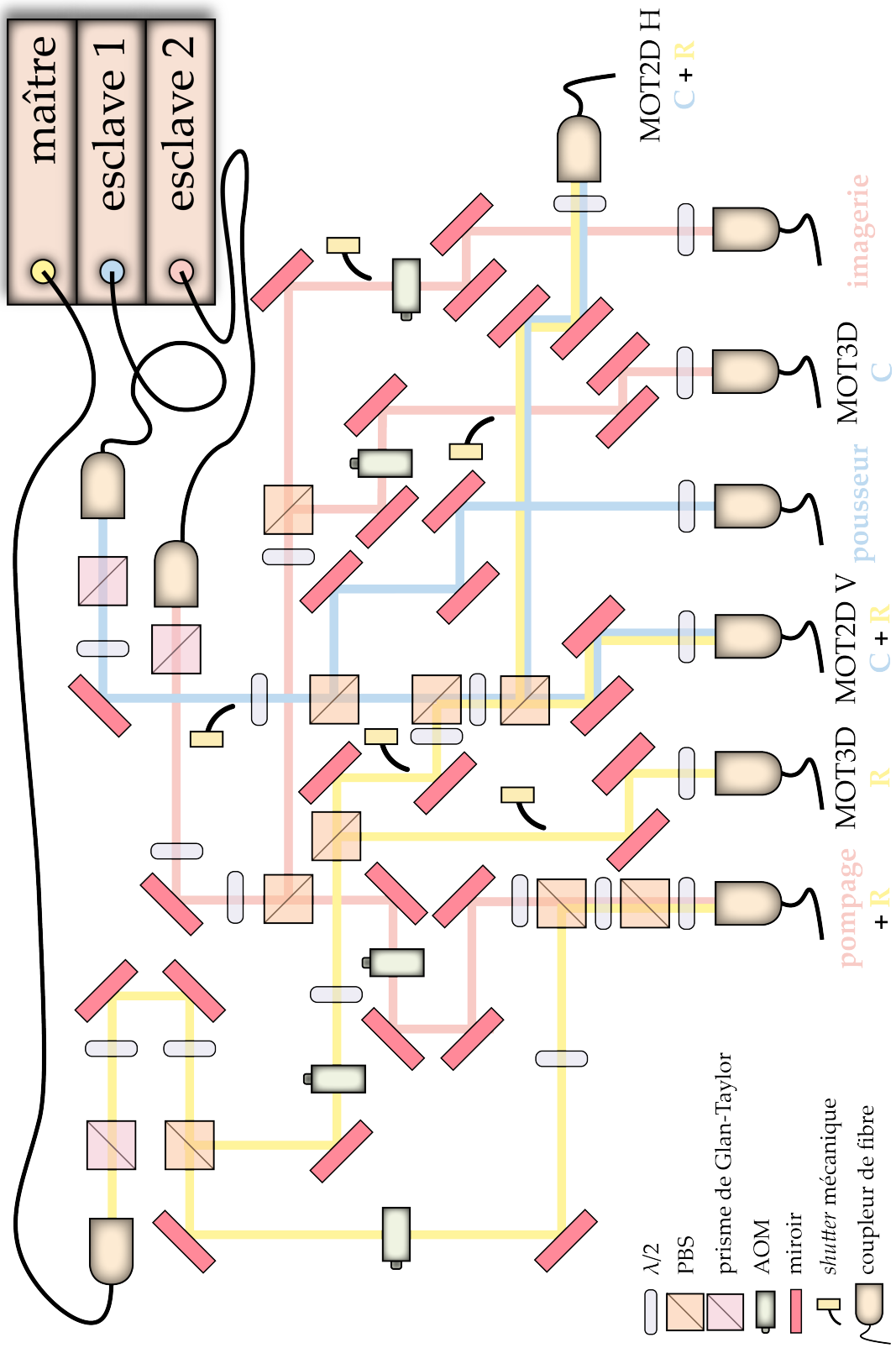


FIGURE 2.2 – **Schéma du banc optique à 780 nm**, inspiré de [Vasquez Bullon, 2016].

2.1.3 Système de détection

Dans notre expérience, les atomes sont imagés par absorption. Le nuage atomique est éclairé par un faisceau sonde proche de la transition atomique. Les atomes absorbent alors certains photons incidents et l'ombre du nuage est imagée par une caméra CCD.

Temps de vol du nuage atomique

Nous considérons un faisceau d'imagerie se propageant selon (Oy) et légèrement désaccordé de la transition $|5S_{1/2}, F = 2\rangle \rightarrow |5P_{3/2}, F' = 3\rangle$ d'une quantité δ_C (voir Fig.2.1). Après traversée du nuage, l'atténuation du faisceau incident est donnée par la loi de Beer-Lambert :

$$I(x,z) = I_0(x,z)e^{-od(x,z)}, \tag{2.1}$$

où I_0 est l'intensité du faisceau avant atténuation et $od(x,z)$ est la densité optique, définie par

$$od(x,z) = \sigma \int_{-\infty}^{+\infty} n(x,y,z)dy, \tag{2.2}$$

avec la section efficace d'absorption σ (supposée constante ici) et la densité d'atomes $n(x,y,z)$. Pour un faisceau sonde faible par rapport à l'intensité de saturation de la transition (ici $I << I_{sat} \simeq 1.67$ mW/cm^2, pour une polarisation circulaire), la section efficace d'absorption s'écrit [Foot, 2005]

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1 + (2\delta_R/\Gamma_0)^2}, \tag{2.3}$$

où $\sigma_0 = \hbar\omega\Gamma_0/2I_{sat}$ est la section efficace à résonance, avec $\Gamma_0 = 2\pi \cdot 6.066$ MHz la largeur de l'état excité et ω la fréquence du faisceau d'imagerie. Nous reviendrons sur ce résultat en fin de chapitre lors de la calibration du nombre d'atomes.

D'après la relation (2.1), la densité optique est expérimentalement donnée par

$$od(x,z) = -\ln\left(\frac{I_f(x,z)}{I_i(x,z)}\right), \tag{2.4}$$

où $I_f(x,z) = I_w(x,z) - I_{fond}(x,z)$ et $I_i(x,z) = I_{wo}(x,z) - I_{fond}(x,z)$ correspondent aux images avec et sans les atomes, respectivement. Pour obtenir ces images, la séquence d'imagerie se réalise en trois étapes (correspondant à 3 images différentes) : (1) le faisceau sonde est envoyé pour prendre une première image d'absorption notée I_w ; (2) une seconde image I_{wo} est prise 500 ms plus tard pour n'imager que le faisceau (sans atomes) ; (3) enfin une troisième image I_{fond} est réalisée en l'absence de faisceau et d'atomes pour soustraire la lumière parasite.

Cette mesure expérimentale (2.4) nous permet également de calculer le nombre d'atomes N au sein du nuage :

$$N = \int n(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \frac{1}{\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} od(x,z)dxdz. \tag{2.5}$$

Expérimentalement, cette intégrale sera calculée en sommant les pixels de la caméra, soit

$$N = \frac{\Delta_x\Delta_z}{\sigma}\sum_i\sum_j od(x_i,z_j), \tag{2.6}$$

où Δ_x et Δ_z sont les dimensions d'un pixel de la CCD.

Dans le régime d'interactions faibles, la température d'un nuage piégé est déduite de la densité du nuage après avoir éteint le piège, *via* son expansion. On appelle cela la méthode par temps de vol (ToF pour *Time of Flight*). Nous cherchons ainsi à mesurer la distribution en vitesses du nuage, donnée par la distribution de Maxwell-Boltzmann pour $T >> T_c$, T étant

la température du nuage et T_c la température critique (voir Chapitre 1 Section 1.1.2). Ainsi, lors de la chute, la distribution de la densité atomique dans le plan (xOz) à l'instant t est donnée par [Brzozowski et al., 2002]

$$n(x,z,t) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2(t)}\right)^{1/2} e^{-x^2/2\sigma_x^2(t)} e^{-z^2(t)/2\sigma_z^2(t)}, \tag{2.7}$$

où la trajectoire selon la gravité (Oz) est donnée par

$$z(t) = z_0 + \frac{1}{2} g t^2, \tag{2.8}$$

et la taille correspondante dans la direction j $(= x, z)$ du nuage vaut quant à elle

$$\sigma_j(t) = \sqrt{\sigma_{0,j}^2 + \frac{k_B T}{m} t^2}, \tag{2.9}$$

avec $\sigma_{0,j}$ la taille initiale du nuage (avant expansion) et m la masse de l'atome. Cette dernière relation montre qu'il est ainsi possible de déduire la taille initiale du nuage $\sigma_{0,j}$ ainsi que sa température T simplement en mesurant l'évolution des dimensions du nuage pendant son temps de chute.

Par ailleurs, cette méthode nous renseigne sur d'autres quantités physiques pertinentes pour caractériser le nuage, telle que la densité dans l'espace des phases ρ_{PSD} (PSD pour *Phase-Space Density*) définie par [Townsend et al., 1995]

$$\rho_{PSD} = n_0 \Lambda_{th}^3 = \frac{N}{\bar{\sigma}_0^3} \frac{\hbar^3}{(m k_B T)^{3/2}}, \tag{2.10}$$

où nous avons utilisé la densité moyenne au centre du nuage $n_0 = N/(2\pi)^{3/2}\bar{\sigma}_0^3$ avec $\bar{\sigma}_0 = \left(\sigma_{0,x}\sigma_{0,y}\sigma_{0,z}\right)^{1/3}$ et la longueur d'onde thermique de *de Broglie* Λ_{th} définie en début de Chapitre 1. Cette quantité (2.10) peut être conceptualisée comme le nombre d'atomes dans une boîte de dimension $\hbar^3$ dans l'espace de phase.

Une autre quantité qui peut être déduite des mesures précédentes est le taux moyen de collisions élastiques à deux corps Γ_e défini, dans le cadre de la théorie cinétique des gaz, par [Dalibard, 2006]

$$\Gamma_e = \sqrt{\frac{2}{\pi}} n_0 \sigma_e \bar{v} = \frac{m\omega^3 \sigma_e N}{2\pi^2 k_B T}, \tag{2.11}$$

avec la section efficace de collision élastique $\sigma_e = 8\pi a_s^2$ et la vitesse moyenne $\bar{v} = \omega\bar{\sigma}_0$, où ω est la fréquence du piège. Ainsi pendant un temps dt, la quantité $\Gamma_e dt$ correspond à la probabilité pour qu'un atome subisse une collision avec un des $N-1$ $(\simeq N)$ autres atomes. Comme nous le verrons un peu plus tard dans ce chapitre, ce processus de collision est très important pour le refroidissement par évaporation, où l'on veut maximiser le taux (2.11). En effet, ces collisions permettent d'éjecter les atomes les plus énergétiques du piège et d'obtenir une thermalisation efficace du gaz.

Système d'imagerie expérimental

Le système d'imagerie est schématisé en Fig.2.3. Le faisceau laser est envoyé sur les atomes puis imagé par un système composé d'une lentille de focale $f' = 150$ mm et d'une caméra CCD. Dans notre configuration le faisceau se propage selon une combinaison des deux directions (Ox) et (Oy).

Pour connaître la taille du nuage atomique, il est nécessaire de caractériser le système d'imagerie en calculant son grandissement γ. Pour cela nous utilisons la méthode par temps

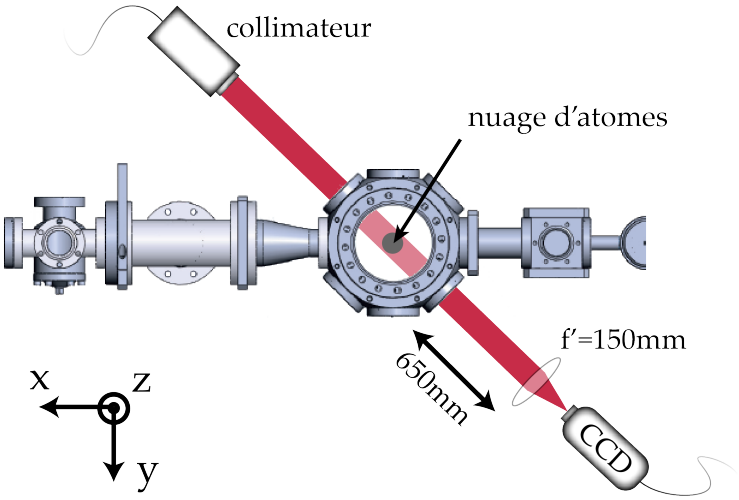


FIGURE 2.3 – **Schéma du dispositif d'imagerie par absorption.** Le système d'imagerie est composé d'une lentille de focale $f' = 150$ positionnée à 65 cm de la chambre à vide et d'une caméra CCD.

de vol décrite dans la section précédente. La trajectoire des atomes suivant la gravité est alors donnée par (2.8), avec un facteur correctif sur le terme quadratique tel que

$$z_{pix}(t) = z_{pix,0} + \frac{1}{2} g \frac{\gamma}{\Delta_z} t^2, \tag{2.12}$$

où nous rappelons que Δ_z est la taille du pixel de la caméra suivant (Oz). Ici la trajectoire est ramenée au nombre de pixels de la caméra. Nous utilisons une caméra CCD de la marque Point Grey Chameleon avec $\Delta_x = \Delta_z = \Delta = 3.75$ µm.

L'évolution d'un nuage d'atomes froids (ici un condensat avec une température de quelques centaines de nK comme nous le verrons plus loin) est tracée en Fig.2.4. Un ajustement des données avec la relation (2.12) nous permet de calculer le grandissement, soit $\gamma \simeq 0.21$.

Maintenant que nous connaissons le grandissement du système d'imagerie il est nécessaire de modifier l'évolution de la taille du nuage (2.9) en conséquence, soit

$$\sigma_j(t) = \frac{\Delta}{\gamma} \sqrt{\sigma_{j,0}^2 + \frac{k_B T}{m} t^2}. \tag{2.13}$$

2.1.4 Limites expérimentales

Avant de présenter la séquence expérimentale qui nous a permis d'atteindre le régime de dégénérescence quantique, nous mentionnons les différentes limites techniques que nous avons pu rencontrer. Ces limites expérimentales sont détaillées dans la thèse précédente de l'expérience [Busquet, 2017].

Une des limites majeures concernait la qualité du vide. Des mesures des temps de vie du piège magnétique (une des étapes de refroidissement, comme nous le verrons ci-après) ont montré que le vide se dégradait dans le temps. En effet, un faible temps de vie du piège magnétique peut être une conséquence de collisions avec les molécules de gaz résiduel [Bjorkholm, 1988], et donc le signe d'un vide de mauvaise qualité. En réalisant des tests de fuite sur l'enceinte à vide avec de l'hélium, nous avons pu confirmer ce doute en détectant une fuite.

Par ailleurs nous avons également mesuré des oscillations du nuage atomique dans le piège magnétique, dues à des courants de Foucault (ou *eddy currents* en anglais, pour courants tourbillonnants). Ce phénomène a été découvert par Léon Foucault en 1855, et mis en

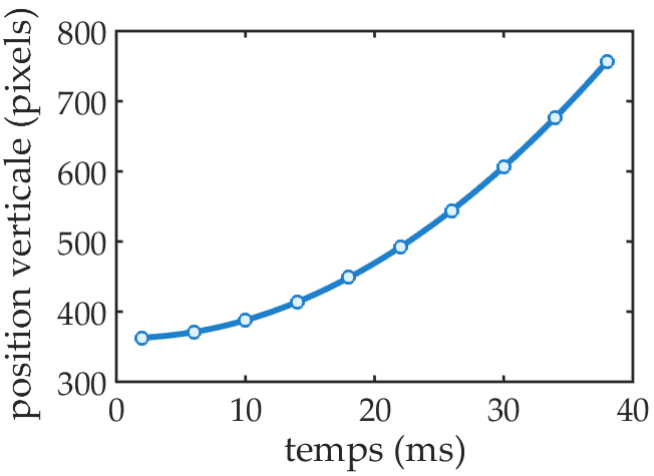


FIGURE 2.4 – **Calibration du grandissement du système d'imagerie par temps de vol.** L'évolution de la position du nuage atomique lorsqu'il chute (méthode du temps de vol) permet de remonter au grandissement du système d'imagerie, soit ici $\gamma = 0.214 \pm 0.002$.

évidence expérimentalement à l'aide d'un échantillon de cuivre entre les pôles d'un électro-aimant [Bertrand, 1878]. Dans notre cas, les forts gradients de champs magnétiques créés par les bobines pour l'étape du piège magnétique induisent des courants dans les parties métalliques proches de l'enceinte à vide (e.g., les supports des bobines), créant un gradient champ magnétique en retour et engendrant des oscillations du nuage avec une période de quelques dizaines de ms.

Ces différents phénomènes ne nous permettaient pas d'atteindre le régime de dégénérescence quantique souhaité (BEC) en raison des limites qu'ils introduisaient sur le refroidissement et le piégeage des atomes. Nous avons donc opéré plusieurs changements conséquents sur l'expérience comme l'installation d'une nouvelle configuration de hublots pour la chambre à vide permettant de rapprocher les bobines des atomes et par conséquent d'atteindre des forts gradients plus facilement (moins de courant donc moins de chauffage et moins de courants de Foucault). Cette configuration sera présentée plus en détails dans la partie suivante. Par ailleurs, après étuvage de la chambre de science (voir Fig.2.5(a)), nous avons installé un système de refroidissement à eau pour ces bobines, photographié en Fig.2.5(b), afin de limiter le chauffage dû à la dissipation des courants circulant dans les bobines, lors de l'étape du piège magnétique notamment. Pour cela nous avons positionné des *waterblocks* (composants traditionnellement utilisés pour refroidir les CPU des ordinateurs) sur les montures des bobines permettant de refroidir ce support *via* un échange thermique. Par ailleurs les supports des bobines ont été réalisés en cuivre en raison des bonnes propriétés thermo-conductrices de ce matériau. Enfin des feuilles de graphite (matériau aux très bonnes propriétés thermo-conductrices également) sont disposées entre les *waterblocks* et les bobines pour faciliter les échanges thermiques. Un relevé de la température est effectué en permanence par des thermistances et une carte électronique Arduino permet de couper l'alimentation en courant des bobines si une valeur seuil est dépassée, signifiant une dissipation par effet Joule trop importante. De plus le support des bobines est coupé afin d'éviter les courants de Foucault. Malheureusement, de nouvelles fuites ont été détectées par la suite, notamment au niveau des nouveaux hublots installés. Ainsi nous avons changé certains hublots ou colmaté les micro-fuites le cas échéant, avec du VacSeal®, solution à base de silicone.

Dans la partie suivante, nous détaillerons l'optimisation de la séquence expérimentale qui nous a permis d'atteindre un condensat.

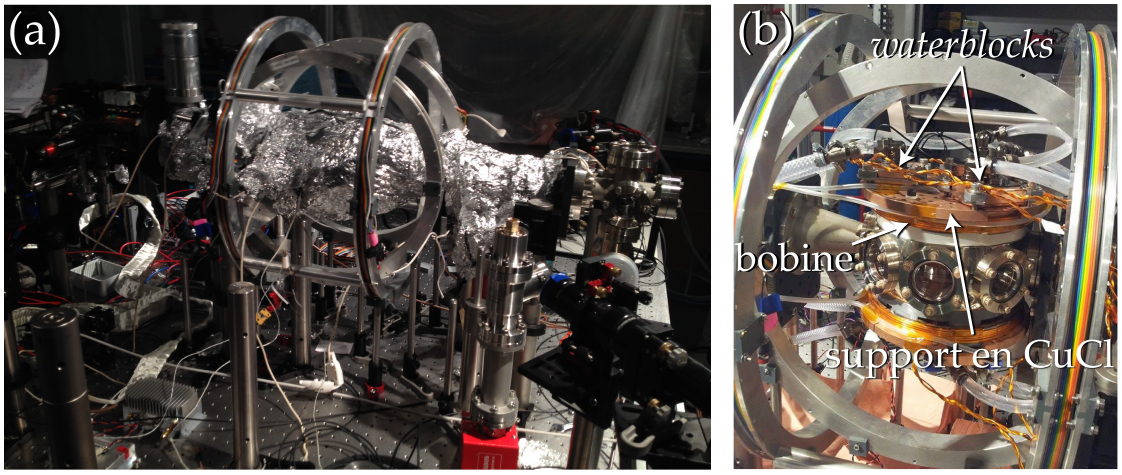


FIGURE 2.5 – **Modifications apportées à l'expérience.** (a) Étuvage de la chambre à vide suite au changement de hublots. (b) Système de refroidissement à eau pour les bobines de champs.

2.2 Etapes de refroidissement expérimentales

Ici nous ne détaillerons pas la théorie derrière le refroidissement et le piégeage d'atomes, déjà largement couverte dans la littérature. Pour plus de détails à ce sujet le lecteur pourra par exemple se référer à [Dalibard, 2015; Metcalf and van der Straten, 1999; Phillips, 1998] ou bien aux thèses précédentes de l'expérience [Busquet, 2017; Vasquez Bullon, 2016] qui expliquent en détails le formalisme théorique des méthodes de refroidissement que nous mettons en place dans le cadre de notre expérience.

2.2.1 Piège Magnéto-Optique 2D et 3D

Nous cherchons dans un premier temps à refroidir et piéger le nuage atomique dans un piége magnéto-optique (MOT pour *Magnetic Optical Trap* en anglais) à trois dimensions, étape clé du refroidissement d'atomes. Il existe différentes façons de charger un MOT 3D, avec par exemple les techniques de ralentissement Zeeman [Phillips and Metcalf, 1982] ou de refroidissement optique pour extraire des jets atomiques d'une vapeur d'atomes à basse pression [Lu et al., 1996]. Dans notre séquence nous chargeons le MOT 3D à l'aide d'un MOT 2D qui permet de générer des flux d'atomes ralentis aux performances comparables à celles des ralentisseurs Zeeman [Dieckmann et al., 1998; Schoser et al., 2002].

Enceintes à vide

Refroidir des atomes consiste à réduire leur vitesse moyenne et la dispersion de vitesse autour de cette moyenne. Ainsi, il est nécessaire de s'affranchir des collisions avec le gaz résiduel à température ambiante. Il faut donc se placer dans le vide. Pour cela nous utilisons un système d'enceintes à vide adapté à notre protocole de refroidissement expérimental représenté en Fig.2.6. Il est composé en deux parties : la première correspond à l'étape du MOT 2D développé au SYRTE (SYstèmes de Référence Temps-Espace) [Cheinet, 2006] dont nous verrons le fonctionnement ci-après ; la seconde est la chambre à vide, de marque Kimball Physics™, où le reste de la séquence de refroidissement se déroule après chargement du MOT 3D. Dans ce système le vide est réalisé dans un premier temps par un étuvage, puis à l'aide de deux pompes ioniques fonctionnant en continu et permettant d'atteindre un vide de l'ordre de $10^{-10} - 10^{-11}$ mbar.

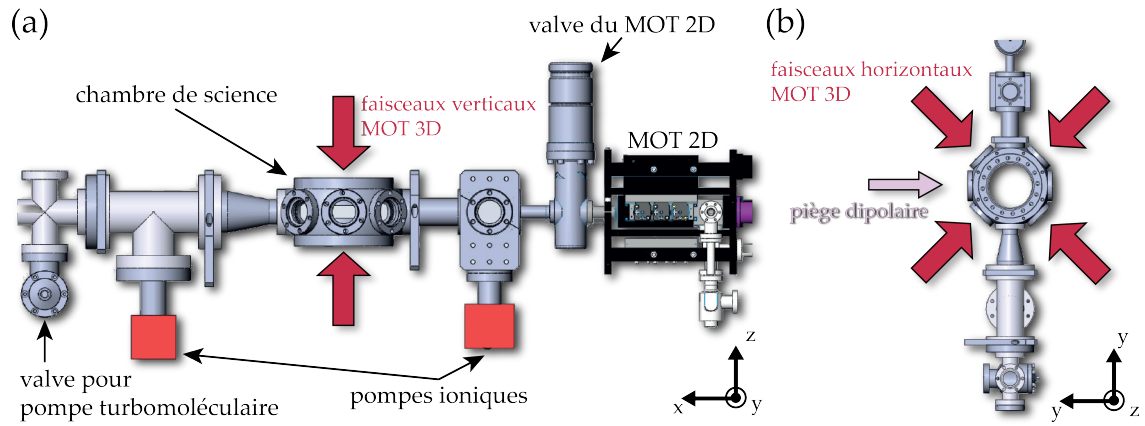


FIGURE 2.6 – **Vues de l'enceinte à vide.** Représentation de l'enceinte à vide dans laquelle les atomes sont refroidis, notamment à l'aide des lasers du MOT (flèches rouges). (a) Vue de profil. (b) Vue de haut.

Principe de fonctionnement des MOT 2D et 3D

Une cellule de Rb est chauffée à température ambiante afin d'obtenir une vapeur d'atomes. Ces derniers sont ensuite refroidis et piégés dans deux directions à l'aide de faisceaux lasers et d'un gradient de champ magnétique générant un zéro de champ sur l'axe de propagation des atomes, respectivement. Cette étape de piège magnéto-optique à 2D (MOT 2D), schématisée en Fig.2.7, permet d'obtenir un jet d'atomes froids. Ces atomes sont ensuite transférés à l'aide d'un faisceau "pousseur" vers la chambre à vide. Celui-ci permet d'agir mécaniquement sur les atomes *via* la force de pression de radiation (cf. relation (1.35) dans le Chapitre 1). D'après les spécifications du SYRTE, ce MOT 2D est capable de fournir des flux de 10^{10} atomes/s avec une vitesse de 13 m/s et une température transverse de 400 µK.

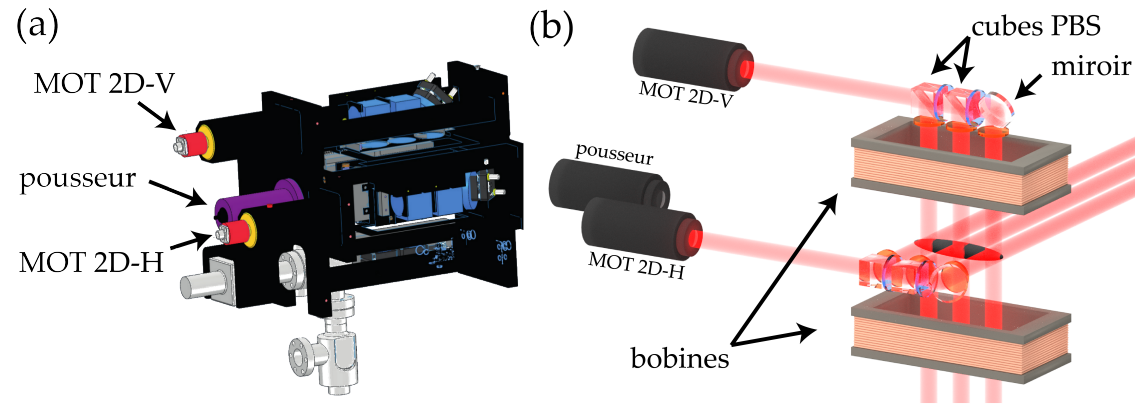


FIGURE 2.7 – **Schéma du dispositif expérimental du MOT 2D.** (a) Dessin Solidworks fourni par le constructeur. Deux faisceaux lasers refroidisseurs vertical (MOT 2D-V) et horizontal (MOT 2D-H) permettent le refroidissement dans deux directions. Un faisceau pousseur permet de transférer les atomes vers la chambre de sciences (MOT 3D). (b) Dans ce schéma, les bobines permettant de générer un champ magnétique pour le confinement des atomes sont représentées ainsi que les différentes optiques : cubes PBS, lames à retard de phase ($\lambda/2$ en bleu et $\lambda/4$ en orange) et miroirs qui permettent la répartition et le réglage de polarisation des lasers.

Les atomes sont déplacés à travers un trou de diamètre de 1.5 mm de diamètre lors du passage entre le MOT 2D et la chambre de science, ceci afin de filtrer les atomes non ralentis et de maintenir une basse pression dans la chambre à vide. En effet, un pompage différentiel est réalisé par une des pompes ioniques afin d'atteindre 10^{-7} mbar au niveau du MOT 2D contre 10^{-9} mbar dans la chambre de sciences. Une fois les atomes filtrés, trois

paires de faisceaux lasers (pour chaque direction) prennent le relais pour refroidir les atomes en complément d'un gradient de champ magnétique [Monroe et al., 1990; Raab et al., 1987], c'est l'étape du MOT 3D dont un schéma est présenté en Fig.2.8(a).

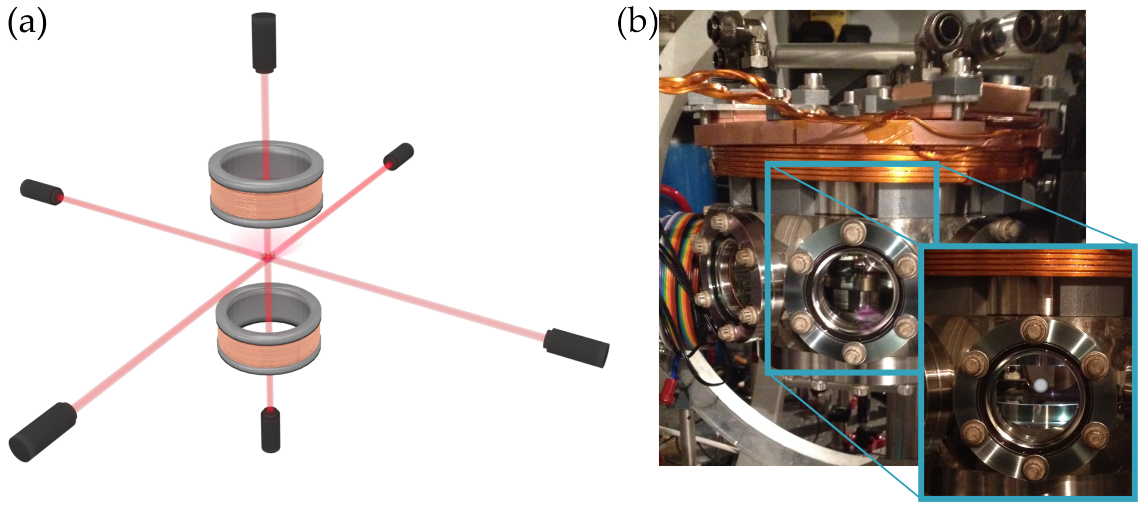


FIGURE 2.8 – **Schéma du MOT 3D et photographie des bobines de champs magnétiques.** (a) Schéma de l'étape du piège magnéto-optique (MOT) à 3D : trois paires de lasers pour chaque direction de l'espace (en rouge) et un gradient de champ magnétique (en rose) permettent de refroidir et piéger les atomes, respectivement. (b) Photographie de la configuration des bobines autour de la chambre à vide permettant la génération de champs magnétiques, avec un zoom à travers un hublot où l'on distingue les deux hublots entrants (direction verticale) permettant de se rapprocher des atomes (symbolisés ici par une sphère grise).

Ce gradient est réalisé à l'aide de bobines disposées dans une configuration anti-Helmholtz. Ce système est en réalité composé de deux paires de bobines (MOT1,MOT2) et (MOT1',MOT2') connectées en série (ce dispositif pourrait aussi être monté en parallèle afin de diminuer la résistance totale). Une photo du système est présentée en Fig.2.8(b) et les propriétés de ces bobines sont résumées dans le Tableau 2.2

bobines	**spires**	**diamètre moyen**	**séparation**	**gradient généré**
(MOT1,MOT2)	48	86 mm	46 mm	2.04 G/cm.A
(MOT1',MOT2')	24	96 mm	93 mm	0.9 G/cm.A

TABLEAU 2.2 – **Caractéristiques des bobines de champ magnétique.**

Par ailleurs un circuit d'asservissement a été développé au laboratoire pour permettre les modifications du champ magnétique en temps réel ou pour éviter les fluctuations lorsque l'on souhaite un gradient constant. Des résistances variables thermalisées mesurent les variations de courant qui sont ensuite corrigées par un proportionnel-intégrateur composé d'un MOSFET (*Metal Oxyde Semiconductor Field Effect Transistor*) qui régule le courant selon la tension à ses bornes et d'un IGBT (*Insulated Gate Bipolar Transistor*) correspondant à un interrupteur électronique rapide pour les forts courants.

Optimisations expérimentales

■ Optimisation du chargement du MOT et mesure du temps de vie

Le prix à payer lorsque l'on refroidit une assemblée d'atomes est la perte de particules afin que le gaz restant se thermalise (e.g., par le biais des collisions). Il est alors important de

partir avec un grand nombre d'atomes dans le MOT 3D. Pour cela l'optimisation est réalisée en collectant la fluorescence émise par le MOT afin d'étudier son chargement notamment. En effet, plus le nombre d'atomes est grand plus le signal de fluorescence est important lorsque l'on envoie un faisceau à résonance de la transition atomique.

L'optimisation s'est donc faite en réglant les différents paramètres du MOT 2D (champs magnétiques, polarisation et désaccord des lasers refroidisseur, alignement du faisceau pousseur) afin d'avoir un chargement rapide. Le nombre d'atomes N dans le MOT en fonction du temps t est tel que $N(t) = N_{max}\left(1 - e^{-t/\tau_{charge}}\right)$, où N_{max} est le nombre final d'atomes dans le MOT et τ_{charge} le temps caractéristique de chargement. Dans notre cas nous avons pu obtenir $N_{max} \simeq 3$ milliards d'atomes dans le MOT 3D. L'évolution de la tension de la photodiode récoltant le signal fluorescence en fonction du temps est présentée en Fig.2.9(a). Pour déduire le temps de chargement, nous ajustons nos données avec une fonction de la forme

$$V(t) = V_{max}\left(1 - e^{-t/\tau_{charge}}\right) + V_0, \tag{2.14}$$

où V est la tension de la photodiode, V_{max} est la tension à laquelle le signal sature et V_0 permet de prendre en compte le bruit sur le signal de la photodiode. Nous trouvons ainsi que le MOT 3D se charge en un temps $\tau_{charge} \simeq 1.4$ s.

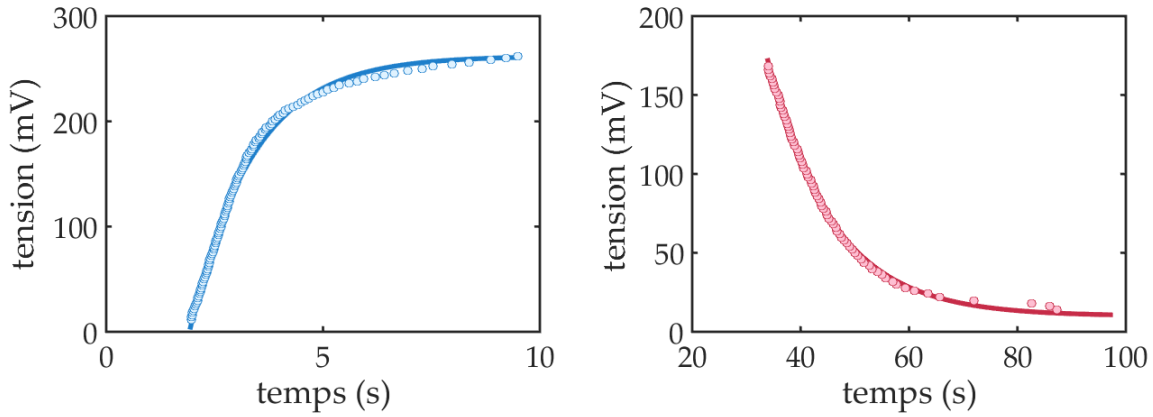


FIGURE 2.9 – **Temps de chargement et temps de vie du MOT 3D.** La fluorescence du MOT 3D est collectée par une photodiode afin d'estimer (a) le temps de chargement, soit ici $\tau_{charge} \simeq 1.43 \pm 0.05$ s, et (b) le temps de vie, soit ici $\tau_{vie} \simeq 12.0 \pm 0.4$ s.

De la même manière en mesurant la fluorescence nous pouvons calculer le temps de vie du piège. Si l'on coupe le chargement (*i.e.*, le MOT 2D), alors le nombre d'atomes va chuter exponentiellement : $N(t) = N_{max}e^{-t/\tau_{vie}}$, où τ_{vie} représente le temps de vie du nuage piégé. Le signal de fluorescence est représenté en Fig.2.9(b), où l'on a ajusté les données avec une fonction de la forme

$$V(t) = V_{max}e^{-t/\tau_{vie}} + V_0. \tag{2.15}$$

Avec cette mesure nous trouvons que le temps de vie du piège est de l'ordre de 12 s. Autrement dit, au bout d'un temps d'environ 1 min, tous les atomes seront perdus. Ce temps est à comparer avec la durée totale de la séquence qui est de l'ordre de 15 s. Malgré différentes tentatives d'amélioration, le temps de vie n'est malheureusement pas très supérieur au temps de vie du piège mais nous estimons qu'il sera suffisant pour les expériences envisagées. Les futures évolutions de l'expérience nécessiteront d'ouvrir le vide, offrant ainsi l'opportunité de changer certains hublots.

■ Calibration de la fréquence d'imagerie

Il est important de connaître la fréquence exacte à laquelle le faisceau d'imagerie est résonant avec la transition atomique, notamment afin d'avoir une estimation correcte du nombre d'atomes, et ainsi pouvoir effectuer une bonne caractérisation du nuage. Nous réalisons donc un MOT 3D que nous imageons pour différentes fréquences d'imagerie afin d'avoir l'évolution du nombre d'atomes, dont le résultat est présenté en Fig.2.10 et dont le profil spectral est de la forme

$$N(\nu - \nu_0) = N_{max} \frac{1}{1 + \left(\frac{\nu - \nu_0}{\Gamma/2}\right)^2}, \tag{2.16}$$

avec N_{max} le nombre maximal d'atomes détectés, ν la fréquence du laser, ν_0 la fréquence à résonance de la transition et Γ la largeur de la transition (théoriquement Γ est égale à la largeur du niveau excité $\Gamma_0 = 2\pi \cdot 6.066$ MHz). L'ajustement des données avec (2.16) nous permet d'obtenir $\{N_{max} \simeq 3.6 \times 10^9, \nu_0 = -2.6\Gamma_0, \Gamma = 0.98\Gamma_0\}$. La valeur de ν_0 est une valeur de référence dans le programme du séquenceur (outil permettant de contrôler les paramètres expérimentaux *via* des cartes analogiques et numérique). Par exemple, pour une fréquence programmée telle que $\nu = \nu_0$, le laser est à résonance avec la transition. Dans l'étude qui va suivre, nous considérons une lumière isotrope pour le faisceau laser d'imagerie qui est polarisé circulairement mais sans champ directeur. Cela correspond à une intensité de saturation $I_{sat} \simeq 3.58$ mW/cm^2 [Steck, 2001]. Nous verrons en fin de chapitre que nous pouvons introduire un facteur correctif sur cette intensité afin de prendre en compte les effets de polarisation ou de champs magnétiques. Ce facteur sera déterminé en imageant un nuage atomique par absorption à forte intensité et permettra de calibrer le nombre d'atomes.

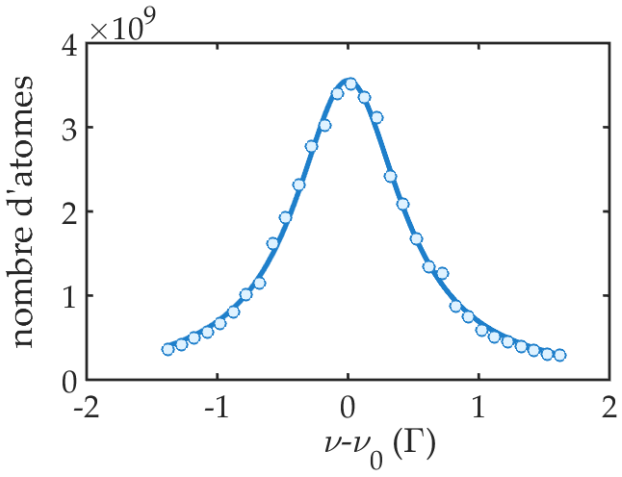


FIGURE 2.10 – **Calibration de la fréquence du faisceau d'imagerie.** Évolution du nombre d'atomes détectés par absorption en fonction de la fréquence du faisceau d'imagerie ν.

■ Optimisation du désaccord des lasers refroidisseurs

Nous mesurons également le nombre d'atomes en fonction du désaccord des lasers "refroidisseurs" afin de trouver la valeur pour laquelle ce nombre est maximal. Un temps de vol pour chaque valeur de fréquence permet d'estimer le nombre d'atomes dont l'évolution est présentée en Fig.2.11(a). Nous trouvons une valeur optimale pour une fréquence des faisceaux autour de -3.35Γ. Nous optimisons le gradient de champ magnétique généré par les bobines de la même manière, *i.e.*, en optimisant le nombre d'atomes. Les mesures sont exposées en Fig.2.11(b) et permettent de déduire un optimum pour un gradient de 9.3 G/cm.

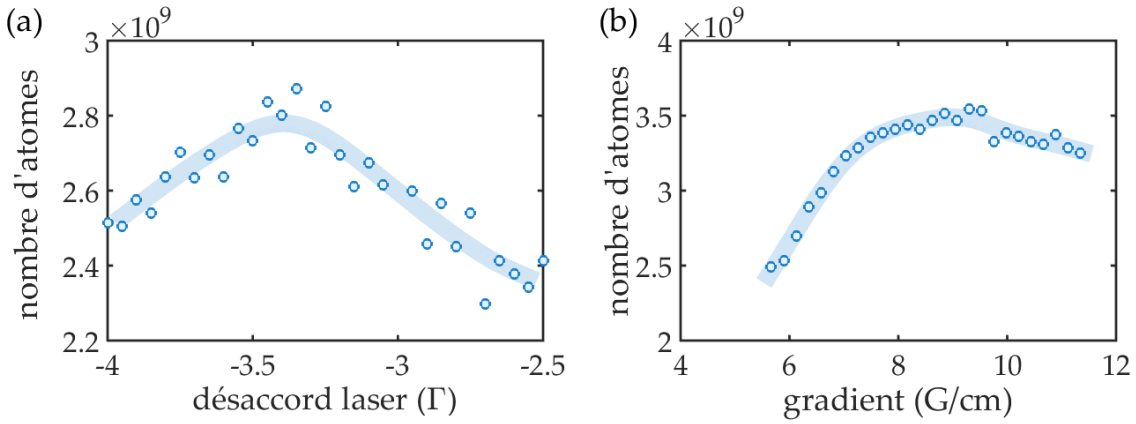


FIGURE 2.11 – **Optimisation du MOT 3D.** Evolution du nombre d'atomes en fonction (a) du désaccord Γ des faisceaux refroidisseurs avec un optimum à -3.35Γ et (b) du gradient magnétique généré par les bobines avec un optimum à 9.3 G/cm. Les traits pleins en bleu représentent la tendance.

Après l'optimisation de cette étape, nous effectuons une mesure par temps de vol pour caractériser le nuage atomique. Nous obtenons un MOT de 2 milliards d'atomes à une température de 470 µK et une densité dans l'espace des phases $\rho_{PSD} \simeq 5 \times 10^{-8}$.

2.2.2 MOT comprimé

Principe

Après avoir chargé le MOT, les désaccords des lasers utilisés pour le refroidissement et les gradients de champ magnétique sont augmentés pour compresser le nuage atomique, c'est le principe du MOT comprimé (CMOT). Cela a pour effet d'augmenter la densité du nuage tout en gardant un large nombre d'atomes [Petrich et al., 1994].

Optimisations expérimentales

Pour optimiser cette étape nous cherchons la valeur du gradient pour laquelle la densité optique (2.4) est maximale. Les mesures correspondantes sont reportées en Fig.2.12(a). Nous constatons une densité optique maximale pour un gradient de 6.2 G/cm. Curieusement cette valeur est inférieure au gradient de champ utilisé lors de l'étape précédente (MOT), ce qui est contraire au principe du CMOT [Petrich et al., 1994]. Nous n'avons pas pu trouver de raison à cela. En revanche, l'augmentation du désaccord des faisceaux lasers nous a permis de gagner un facteur 100 sur la densité dans l'espace des phases ρ_{PSD}.

Une autre valeur optimisée est la puissance du repompeur qui permet de retirer les atomes de l'état noir $|5S_{1/2}, F = 1\rangle$. Ici la valeur est réduite par rapport à l'étape précédente afin de limiter la réabsorption de photons. Pour cela nous balayons la tension appliquée sur l'atténuateur dans la chaîne de l'AOM correspondant (permettant ainsi de jouer sur la puissance diffractée dans chaque ordre). Les résultats, tracés en Fig.2.12(b), permettent de trouver une puissance optimale de 4.3 mW par collimateur pour le repompeur, correspondant à une tension de 1.6 V sur l'atténuateur.

L'optimisation de cette étape nous a permis d'avoir un nuage plus dense, $n = 6.2 \times 10^{11}$ atomes/cm^3 (soit un facteur 10 en plus), à une température de 121 µK et sans perdre d'atomes ($N \simeq 2 \times 10^9$ atomes).

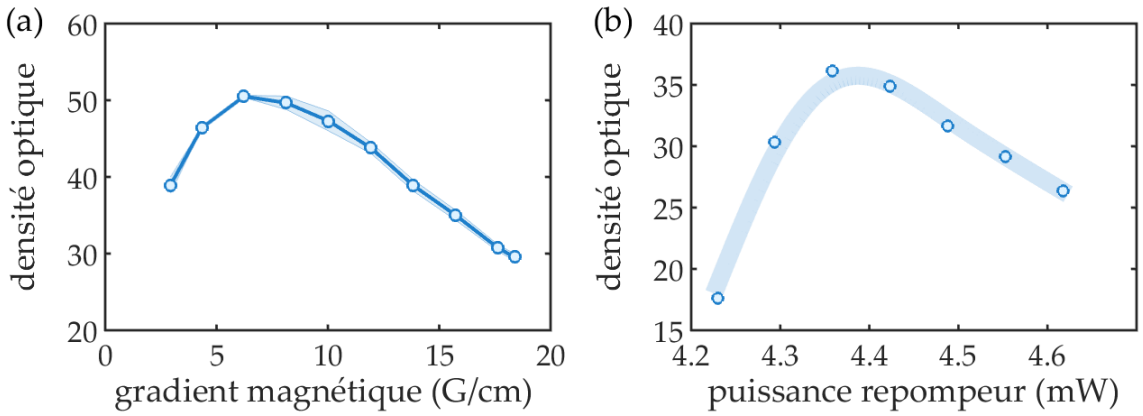


FIGURE 2.12 – **Optimisation du MOT comprimé.** Evolution de la densité optique du CMOT en fonction (a) du gradient de champ magnétique, avec un optimum à 6.2 G/cm et (b) de la puissance du repompeur par collimateur, avec un optimum à 4.33 mW. Le trait plein bleu représente (a) l'incertitude sur les mesures (2 temps de vols sont réalisés pour chaque valeur de gradient) tandis que pour (b) le trait est tracé pour représenter la tendance de l'évolution.

2.2.3 Mélasse optique

Principe

Cette étape utilise le refroidissement par effet Sisyphe [Dalibard and Cohen-Tannoudji, 1989; Ungar et al., 1989], dont le principe se résume de manière suivante : l'atome gravit une colline de potentiel, son énergie cinétique se convertit alors en énergie potentielle. Une fois en haut, un mécanisme de pompage optique le fait passer dans un puits de potentiel associé à un autre état. Lors de ce processus, le photon émis emporte avec lui l'énergie potentielle. L'atome se retrouve alors à gravir de nouveau une colline de potentiel. Après plusieurs cycles de pompage, l'énergie cinétique de l'atome est diminuée. Cela permet d'obtenir des températures inférieures à la limite atteignable par refroidissement Doppler [Castin et al., 1989].

[Dalibard and Cohen-Tannoudji, 1989] ont montré que la température minimale que l'on pouvait atteindre avec cette méthode était proportionnelle à l'inverse du désaccord des faisceaux lasers δ_C. L'idée est donc d'augmenter le désaccord pour refroidir plus efficacement. Pour cela, les gradients de champ magnétique sont coupés lors de cette étape. Cependant, des bobines de champs (en configuration Helmholtz) ont été optimisées et permettent de compenser les champs parasites, ce sont les bobines de compensations (voir photo en Fig.2.13(a)).

Optimisations expérimentales

Comme décrit précédemment, nous cherchons la valeur de désaccord optimale pour laquelle nous avons à la fois une importante densité optique après temps de vol et une faible température. Cette optimisation est présentée en Fig.2.13(b) et un désaccord de -23Γ semble un bon compromis. A la fin de cette étape nous atteignons une température de 39 µK pour une densité dans l'espace de phase $\rho_{PSD} = 10^{-5}$, soit un ordre de grandeur en plus comparé à l'étape précédente.

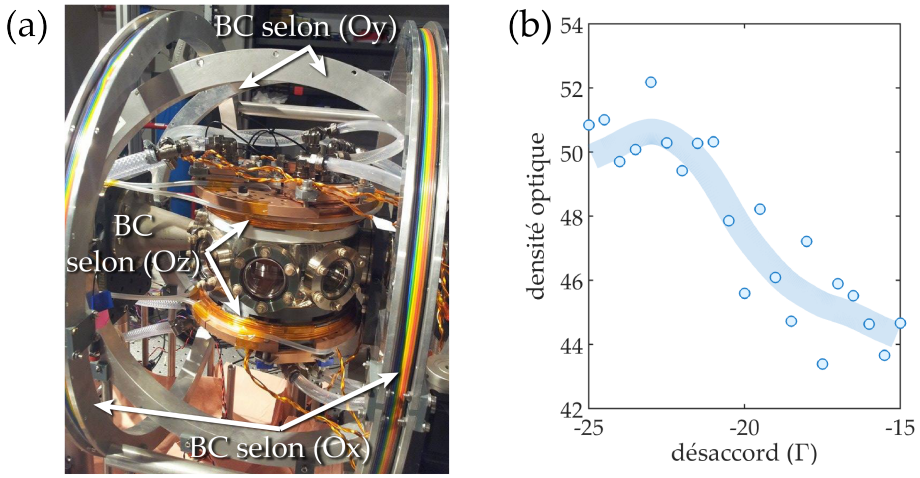


FIGURE 2.13 – **Photographie des bobines de compensation et optimisation de la mélasse optique.** (a) Les bobines de compensations (BC) permettent de générer un gradient pour compenser les champs magnétiques parasites. (b) Évolution de la densité optique du nuage atomique en fonction du désaccord des faisceaux refroidisseurs. L'optimum est -23Γ.

2.2.4 Refroidissement par évaporation dans un piège magnétique

Principe

Les différentes étapes de refroidissement décrites ci-dessus sont des techniques optiques. Les températures et les densités atteignables sont limitées par le chauffage par émission spontanée et les collisions inélastiques induites par la lumière [Ketterle et al., 1999]. Pour aller plus loin, il est nécessaire de procéder à un refroidissement par évaporation dans un piège conservatif. Cette méthode de refroidissement, initialement exposée par [Hess, 1986] pour des atomes d'hydrogène, consiste à retirer les atomes les plus chauds du piège en utilisant des processus de collision à deux corps. Deux atomes vont collisionner et le plus énergétique des deux après impact est éjecté du piège tandis que l'autre se thermalise avec le reste du nuage. Ce processus est analogue au phénomène de refroidissement d'un liquide chaud lorsque l'on souffle dessus pour retirer les molécules les plus chaudes. Le refroidissement par évaporation peut être extrêmement efficace en terme de réduction de l'énergie cinétique moyenne par atome évaporé.

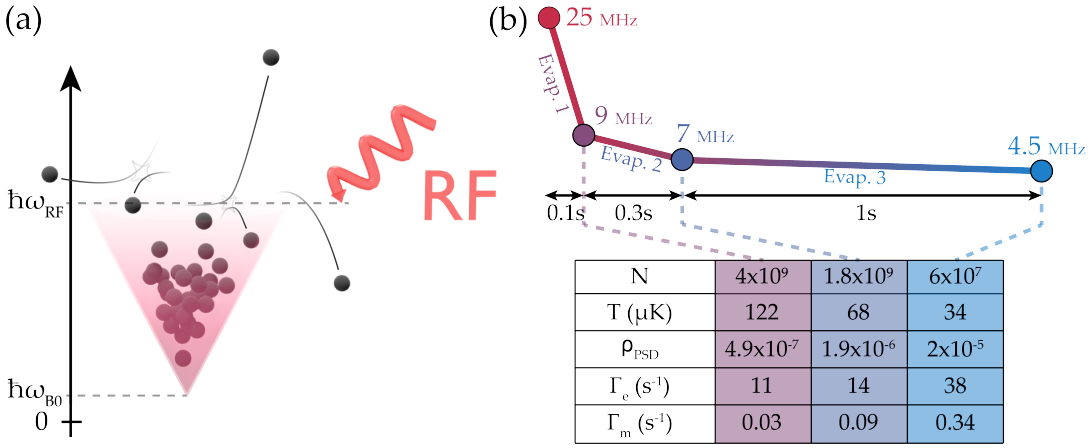
Pour effectuer cette étape, nous dépompons les atomes dans l'état fondamental de l'état $F = 2$ à l'état $F = 1$ par une impulsion de 100 µs d'un faisceau laser accordé sur la transition $|5S_{1/2}, F = 2\rangle \rightarrow |5P_{3/2}, F' = 2\rangle$. Ensuite ces atomes sont chargés dans un piège magnétique avec un fort gradient. A la fin du chargement, deux tiers des atomes sont perdus car le piégeage magnétique se fait seulement pour un état hyperfin (répartition égale des atomes dans les trois niveaux hyperfins ($m_F = 0, \pm 1$) pour l'état $F = 1$). Enfin l'évaporation est réalisée avec une onde radio-fréquence (RF) qui permet de couper le piège magnétique à une certaine hauteur pour que les atomes les plus énergétiques soient éjectés après collision tandis que ceux restant thermalisent au fond du potentiel (voir Fig.2.14(a)) [Ketterle and Druten, 1996].

Optimisations expérimentales

Expérimentalement, nous réalisons un piège magnétique avec un gradient de 162 gauss/cm en 10 ms, résultant en un nuage avec une plus faible densité dans l'espace des phases (3.5×10^{-7}) car le nombre d'atomes a diminué et une température plus importante de 150 µK en raison de l'augmentation brutale du gradient magnétique qui a entraîné une hausse de l'énergie cinétique.

Comme nous l'avons mentionné précédemment, nous réalisons une évaporation en appliquant une onde RF dans le piège magnétique avec une fréquence définie par $\omega_{rf} = g_F m_F \mu_B B/\hbar$

[Davis et al., 1995] avec g_F le facteur de Landé, m_F le niveau hyperfin dans lequel l'atome est piégé, μ_B le magnéton de Bohr et B le module du champ magnétique. Cette étape est décomposée en rampes afin d'optimiser ρ_{PSD}. Les différents paramètres expérimentaux (valeurs initiale et finale de la fréquence RF pour chaque rampe, durée de la rampe et puissance) sont alors balayés et nous permettent d'obtenir la séquence illustrée en Fig.2.14(b). La séquence optimale est composée de 3 rampes pendant lesquelles le couteau RF passe de 25 à 9 MHz en 0.1 s, de 9 à 7 MHz en 0.3 s puis de 7 à 4.5 MHz en 1 s.



N	$4x10^9$	$1.8x10^9$	$6x10^7$
T (μK)	122	68	34
ρ_{PSD}	$4.9x10^{-7}$	$1.9x10^{-6}$	$2x10^{-5}$
Γ_e (s^{-1})	11	14	38
Γ_m (s^{-1})	0.03	0.09	0.34

FIGURE 2.14 – **Principe et séquence expérimentale du refroidissement par évaporation.** (a) Une onde radio-fréquence (RF) d'énergie $\hbar\omega_{RF}$ permet de tronquer le piège magnétique (en rose) à une certaine hauteur. Le minimum de ce potentiel magnétique $\hbar\omega_{B0}$ correspond au minimum de champ. Grâce aux collisions les atomes se thermalisent, les plus énergétiques étant éjectés du piège. (b) La séquence expérimentale de refroidissement par évaporations RF est composée de trois rampes : la première coupe le piège de 25 à 9 MHz pendant 0.1 s, dans la seconde nous passons d'un couteau RF de 9 à 7 MHz en 0.3 s et enfin la dernière rampe permet d'abaisser cette valeur à 4.5 MHz pendant 1 seconde. Les résultats correspondant à chaque étape sont indiqués dans le tableau avec le nombre d'atomes N, la température T, la densité dans l'espace des phases ρ_{PSD}, le taux de collisions élastiques Γ_e et le taux de perte par effet Majorana Γ_m.

Pendant cette évaporation il est important d'avoir un taux de collisions élastiques élevé car c'est ce processus qui permet la thermalisation du gaz. Les valeurs de ce taux, défini par (2.11), sont indiquées pour chaque rampe en Fig.2.14(b). Lors de la dernière évaporation nous obtenons ainsi un taux de 38 collisions/s. Nous avons également calculé le taux de pertes par effet Majorana, défini par [Sukumar and Brink, 1997]

$$\Gamma_m \simeq \frac{\pi\omega_t}{2} e^{-\frac{\omega_L}{\omega_t}-\frac{1}{2}}, \tag{2.17}$$

où ω_t et $\omega_L = \mu_B B/\hbar$ correspondent aux fréquences de piégeage et de Larmor, respectivement. Cette perte est due au retournement de spin de certains atomes piégés lorsque ces derniers se retrouvent spatialement au zéro de champ magnétique. Les fréquences de piégeage à chaque instant de l'évaporation dans un piège magnétique ne sont pas définies, ainsi [Petrich et al., 1995] ont proposé de calculer le flux d'atomes au voisinage du zéro de champ magnétique. De cette manière, ce taux (2.17) peut se réécrire [Lin et al., 2009]

$$\Gamma_m \approx 1.85 \frac{\hbar}{m}\left(\frac{\mu_B B'}{k_B T}\right)^2, \tag{2.18}$$

avec m la masse de l'atome, B' le gradient de champ magnétique et T la température du nuage. C'est ce calcul que nous effectuons pour estimer les pertes par effet Majorana (voir Fig. 2.14(b)). Ce sont ces pertes, en compétition avec les collisions élastiques, qui limitent l'augmentation de la densité dans l'espace des phases à la fin de l'évaporation. Par exemple

ici, à la fin de l'évaporation ce taux vaut $\Gamma_m \simeq 0.34\ s^{-1}$, ce qui signifie qu'un atome est perdu au bout de 3 s.

Cette étape de refroidissement nous permet d'obtenir une température 5 fois plus faible, soit $T \simeq 34\ \mu K$ et de gagner deux ordres de grandeur pour la densité dans l'espace des phases, soit $\rho_{PSD} \simeq 2 \times 10^{-5}$.

Nous avons aussi réalisé une mesure du temps de vie du piège magnétique qui nous permet d'estimer notamment la qualité du vide. En effet, ce temps est limité par les pertes par effet Majorana (définies ci-dessus) et par les collisions avec le gaz résiduel dans l'enceinte à vide, comme nous avons pu le voir lors de la discussion sur les limites expérimentales en section 2.1.4. De manière similaire à la mesure du temps de vie du MOT, nous mesurons ici la décroissance exponentielle du nombre d'atomes en fonction du temps, dont l'évolution est présentée en Fig.(2.15). Un ajustement des données nous permet de trouver un temps de vie de l'ordre de 12 s.

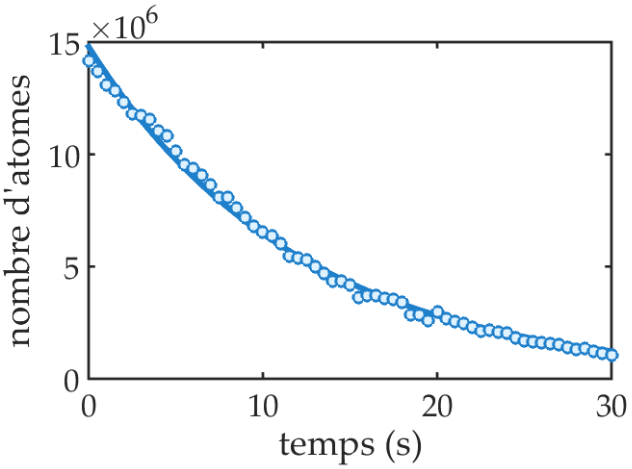


FIGURE 2.15 – **Temps de vie du piège magnétique.** Évolution du nombre d'atomes dans le piège magnétique en fonction du temps. La décroissance exponentielle nous renseigne sur le temps de vie du piège.

2.2.5 Piège hybride

Principe

La fin de la séquence de refroidissement se déroule en combinant un piégeage magnétique et optique, de sorte à réaliser un piège hybride. Cette méthode a été proposée par [Lin et al., 2009]. A la fin de l'évaporation RF, lorsque les retournements de spins (pertes par Majorana) provoquent trop de pertes et de chauffage, le nuage atomique est chargé du piège magnétique vers un piège dipolaire. Cette technique est adaptée à notre expérience car elle n'utilise qu'un seul faisceau laser pour le piégeage optique, ce qui signifie moins de difficulté pour l'accès optique.

En fin d'évaporation, le gradient de champ magnétique suivant l'axe vertical est diminué jusqu'à compenser la gravité, soit $B' = 30$ gauss/cm. Le faisceau laser est alors le seul à assurer le confinement dans la direction (Oz) tandis que le confinement dans le plan horizontal (xOy) est réalisé par le gradient de champ magnétique. Des simulations sur le piège hybride ont été réalisées dans la thèse précédente [Busquet, 2017] et les résultats pour une certaine configuration sont résumés dans le Tableau 2.3. Ainsi, avec un faisceau laser de *waist* $w_0 = 49\ \mu m$ (la mesure expérimentale sera donnée en section 2.2.5) et de puissance 3.22 W, on forme un piège optique de profondeur $|U_0| = 127\ \mu K$ décalé d'une position δ_{pos} du zéro du piège magnétique (pour éviter les pertes par effet Majorana) dont le gradient vaut $B' = 30$ G

(pour compenser la gravité). Cela donne les fréquences de piégeage théoriques suivantes : $(\omega_x, \omega_y, \omega_z) = 2\pi \cdot (717, 28, 715)$ Hz.

$\mathbf{P_0}$(W)	$\lvert\mathbf{U_0}\rvert(\mu\mathbf{K})$	B′ (G/cm)	$\delta_{\mathbf{pos}}(\mu\mathbf{m})$	$(\omega_\mathbf{x}/2\pi, \omega_\mathbf{y}/2\pi, \omega_\mathbf{z}/2\pi)$ (en Hz)
3.22	127	30	70	(717,28,715)

TABLEAU 2.3 – **Résultats des simulations sur le piège hybride**, tirés de [Busquet, 2017].

Spectroscopie micro-ondes

Afin de rendre efficace le chargement d'atomes dans le piège dipolaire, il est important de situer spatialement le zéro de champ magnétique. Pour cela nous réalisons une spectroscopie micro-ondes de l'état fondamental $5S_{1/2}$ dont le principe est le suivant : une impulsion micro-onde de fréquence égale à l'écart hyperfin entre les états F = 1 et F = 2 de l'état fondamental permet de repomper les atomes, piégés magnétiquement dans l'état noir F = 1 (car nous sondons sur F=2). En présence d'un champ magnétique B les états m_F des niveaux hyperfins sont décalés par effet Zeeman d'une quantité

$$\Delta E = g_F m_F \mu_B B. \tag{2.19}$$

Ainsi seuls les états $m_F = 0$ restent inchangés et leur écart énergétique est constant (~ 6.865 GHz). En présence d'un champ parasite, les niveaux sont décalés. En mesurant la modification des fréquences de transition, schématisées en Fig.2.16(a), nous obtenons une mesure de la norme du champ parasite. L'idée est donc de balayer les valeurs de champs générés par les bobines de compensation et la fréquence micro-onde afin de trouver les valeurs de gradients qui compensent les champs parasites.

Dans un premier temps nous réalisons une spectroscopie micro-ondes avec les gradients de champ générés par les bobines de compensation lors de l'étape de la mélasse optique. Les mesures du nombre d'atomes au sein du nuage en fonction de la fréquence de l'impulsion micro-onde sont reportées en Fig.2.16(b). Nous observons des pics correspondant aux différentes transitions possibles (schématisées en Fig.2.16(a)). Le pic central devrait théoriquement être le plus grand en amplitude (car la transition a plus de chance de se produire) contrairement à ce qui est observé ici. Cela est dû à l'analyse des données qui filtrent les résultats estimés comme incohérents. Les pics extérieurs sont quant à eux spectralement plus larges (quelques dizaines de kHz) en raison des inhomogénéités du champ externe. Nous pouvons calculer une première estimation du champ magnétique parasite en notant que d'après (2.19), le décalage en fréquence Zeeman est $\Delta\nu_{m_F} \simeq 0.7 m_F$ MHz/G, où nous avons utilisé $g_F \approx 1/2$ [Corney, 1997] et 1 G = 10^{-4} T par définition. Ainsi si nous prenons par exemple le pic de la transition (0,+1) (en orange) positionné à une fréquence d'environ 315 kHz, cela signifie que l'état $|F = 2, m_F = 1\rangle$ est décalé par un champ résiduel $B_{res} \sim 450$ mG.

A présent, nous mesurons le nombre d'atomes dans le nuage en fonction de la fréquence micro-onde de l'impulsion et des tensions de contrôle des bobines de compensations pour chaque direction de l'espace. Les mesures correspondant à la paire de bobines centrées sur l'axe (Oz) pour la transition (0,-1) sont présentées en Fig.2.17. Un ajustement gaussien est réalisé pour chaque valeur de tension afin de déterminer la fréquence ν pour laquelle le nombre d'atomes est maximal. L'évolution de la fréquence en fonction de la tension de contrôle des bobines de compensations $V_{comp,z}$ est une hyberbole de la forme

$$\begin{aligned} \nu_z &\propto -\frac{\mu_B}{\hbar}|B| \\ &\propto -\frac{\mu_B}{\hbar}\sqrt{(\Delta\nu_{-1} B_{res})^2 + K_z^2\left(V_{comp,z} - V_{comp,z}^{(0)}\right)^2}, \end{aligned} \tag{2.20}$$

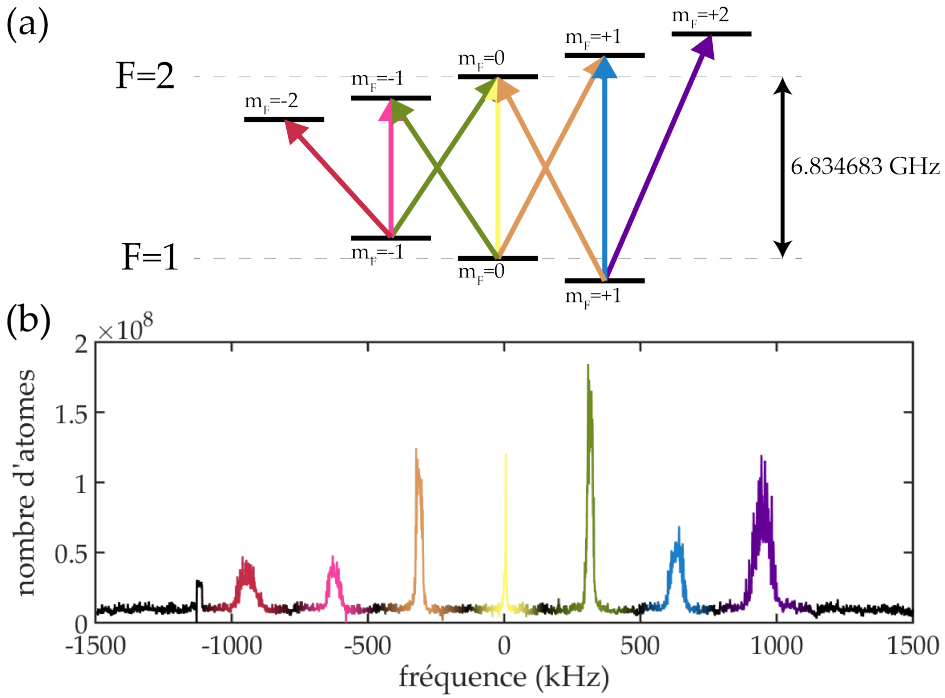


FIGURE 2.16 – **Spectroscopie des états** F = 1 **et** F = 2 **du niveau** $5S_{1/2}$**.** (a) Schéma des transitions possibles entre les sous-niveaux des états hyperfins F = 1 et F = 2 de l'état fondamental $5S_{1/2}$ après la levée de dégénérescence par un champ magnétique. (b) Le nombre d'atomes dans le nuage atomique est mesuré en fonction de la fréquence de l'impulsion micro-onde. L'axe des abscisses est recentré sur la fréquence entre les deux états hyperfins F = 1 et F = 2 en l'absence de champ, soit ~ 6.385 GHz. On observe des pics qui correspondent aux différentes transitions (symbolisées par des couleurs) traduisant la présence d'un champ magnétique résiduel.

où $\Delta\nu_{-1}B_{res}$ est le décalage en fréquence de la transition par effet Zeeman dû au champ magnétique résiduel $B_{res} = \sqrt{|B_x|^2 + |B_y|^2}$, K_z correspond à la pente asymptotique de ce décalage induit par les bobines de compensation en kHz/V et $V^{(0)}_{comp,z}$ la tension à régler aux bornes des bobines pour compenser les champs parasites [1]. Cette dernière est appliquée aux bornes d'un circuit électronique qui contrôle le courant envoyé dans les bobines. Celles-ci génèrent à leur tour le champ magnétique qui agit sur le déplacement des transitions. Connaissant le décalage $\Delta\nu_{-1}$, la pente K_z peut alors être convertie en G/V. Par ailleurs lors de ces mesures, nous introduisons un champ magnétique de biais afin d'éviter tout chevauchement entre deux transitions lors du balayage des gradients de champ magnétique. D'après notre ajustement, la valeur pour compenser ces champs selon (Oz) vaut ici $V^{(0)}_{comp,z} = -0.490$ V pour un champ correspondant $B_{comp,z} = 442$ mG. Ce résultat est très proche de notre première estimation (450 mG) en fin de paragraphe précédent. La même étude a été réalisée pour les deux autres directions et les résultats donnent $\left(V^{(0)}_{comp,x}, V^{(0)}_{comp,y}\right) = (-0.037\text{ V}, -0.037\text{ V})$ pour des champs $\left(B_{comp,x}, B_{comp,y}\right) = (56\text{ mG}, 53\text{ mG})$.

Chargement dans le piège dipolaire et évaporations optiques

Après avoir identifié le zéro de champ, nous pouvons commencer le chargement dans le piège hybride. Pour cela nous créons un piège dipolaire en focalisant un faisceau à 1064 nm au centre de l'enceinte à vide. Comme mentionné précédemment, afin d'avoir un transfert efficace (*i.e.*, éviter les pertes Majorana) le faisceau laser est décalé d'une quantité δ_{pos} du zéro de champ magnétique. En fin d'évaporation RF, nous atteignons une température

1. En réalité, la tension programmée dans Cicero est décalée de 0.01 V par rapport à la tension réelle aux bornes des bobines.

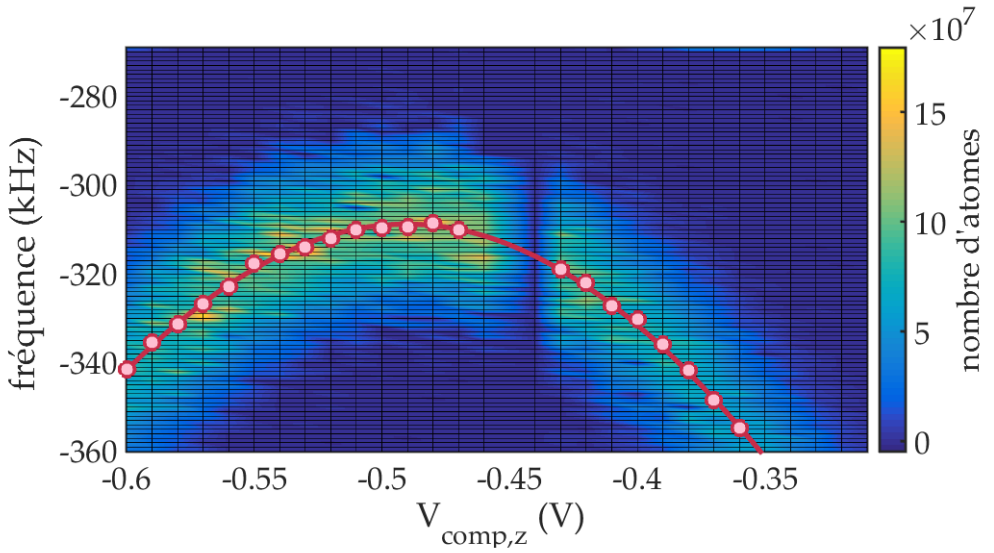


FIGURE 2.17 – **Évolution du nombre d'atomes en fonction de la fréquence des impulsions micro-ondes et de la tension des bobines selon (Oz).** Le nombre d'atomes dans le nuage est mesuré en fonction de la fréquence de l'impulsion micro-onde envoyée et de la tension aux bornes des bobines générant un gradient de champ selon l'axe vertical (Oz). Le profil du nombre d'atomes N est ajusté par une gaussienne pour chaque valeur de tension afin de déterminer la valeur pour laquelle N est maximal (cercles rouges). Ensuite le décalage fréquentiel pour lequel ce nombre est maximal est ajusté par une fonction hyperbolique de la forme (2.20) (trait rouge), ici $K_z = 1.336\,\text{MHz/V} \equiv 1.91\,\text{G/V}$.

de l'ordre de la dizaine de µK, ainsi nous pouvons considérer que nous ne perdons pas d'atomes si nous réalisons un piège dipolaire avec une profondeur autour de 100 µK, soit un ordre de grandeur de différence.

Nous réalisons donc un piège optique correspondant aux simulations réalisées (voir Tableau 2.3 précédemment) dont le montage expérimental est présenté en Fig.2.18. Un laser à 1064 nm (Mephisto MOPA du groupe Coherent®) émet un faisceau dont une partie de la puissance (quelques watts) est prélevée à l'aide d'une lame demi-onde et d'un cube polariseur. Ce faisceau est focalisé sur un AOM qui le diffracte dans différents ordres, dont l'un d'eux est injecté dans une fibre haute-puissance mono-mode afin de préserver le mode gaussien du faisceau. L'AOM nous permet d'allumer ou éteindre le piège dipolaire dans des temps courts (de l'ordre de la µs) ou de modifier la puissance du faisceau dans l'enceinte. En sortie de fibre, un télescope assure la collimation du faisceau qui est ensuite focalisé dans l'enceinte avec un doublet de focale $f' = 150$ mm. Un asservissement en puissance a également été mis en place afin de s'assurer de la stabilité des paramètres du piège et pour réaliser des rampes de puissance. Cela est réalisé en prélevant une partie du faisceau en sortie de fibre *via* une photodiode dont le signal est comparé à un signal de référence. Un proportionnel-intégrateur (PI) permet alors de réguler la tension envoyée à l'AOM.

Avec ce montage nous réalisons un piège dipolaire avec un faisceau de puissance $P_0 = 3.22$ W focalisé sur un waist de 50 µm (valeur qui sera calculée à partir des mesures d'oscillations du piège dans la partie suivante). Le gradient magnétique passe de 180 à 30 G/cm, puis le piège dipolaire est mis en route et chargé, avec un couteau RF maintenu à 2 MHz. Dans cette configuration, nous obtenons un nuage avec une température de 27 µK. Pour refroidir davantage il est nécessaire de réaliser une évaporation optique. Le principe est identique aux évaporations magnétiques, la puissance du faisceau laser (analogue au couteau RF) est diminuée pour réduire la profondeur du piège optique (analogue au piège magnétique). Quatre étapes d'évaporation sont réalisées dont les deux premières sont résumées dans le Tableau 2.4 avec les résultats correspondants. Dès la première évaporation, on observe que la densité dans l'espace est augmentée d'un ordre de grandeur, tandis que la seconde permet

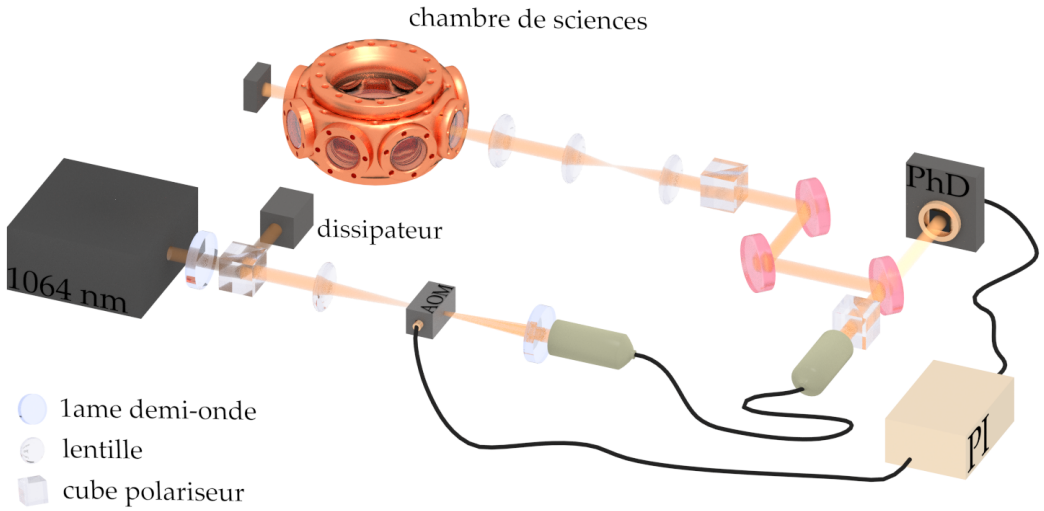


FIGURE 2.18 – **Schéma du montage expérimental pour le piège dipolaire.** Un laser à 1064 nm émet un rayonnement à forte puissance (~ 50 W) dont quelques watts sont prélevés par une lame demi-onde et un cube polariseur. Un AOM permet de diffracter ou non le faisceau qui est ensuite injecté dans une fibre optique. Une partie est transmise par un miroir puis focalisée sur une photodiode (PhD) pour asservir le faisceau en puissance par une boucle de rétroaction sur l'AOM à l'aide d'un proportionnel-intégrateur (PI). La partie réfléchie par le miroir traverse ensuite un télescope pour assurer la collimation du faisceau dans la chambre à vide dans laquelle les atomes se trouvent.

de gagner encore deux ordres de grandeurs, soit $\rho_{PSD} = 1.1 \times 10^{-2}$. En raison de la faible résolution du système d'imagerie, les résultats de la troisième étape ne sont pas exploitables, cependant nous constatons que les deux premières évaporations permettent un refroidissement efficace, notamment par l'augmentation du taux de collisions. Enfin la quatrième et dernière étape (non montrée ici) nous a permis d'atteindre le régime de dégénérescence quantique (BEC), comme nous le verrons dans la partie 2.3.

	piège hybride	**évap. 1**	**évap. 2**
$\mathbf{P_0}$ (W)	3.2	0.4	0.168
N	2×10^7	5×10^6	3.7×10^6
T (μK)	27	2.8	0.88
n (at/cm^3)		5.4×10^{11}	1.4×10^{12}
ρ_{PSD}		7.4×10^{-4}	1.1×10^{-2}
Γ_e (s^{-1})		9	14

TABLEAU 2.4 – **Résultats du piège hybride et des deux premières étapes d'évaporations optiques.** Les cases oranges signifient que les données ne sont pas exploitables pour en tirer des résultats pertinents (mauvais ajustement de la taille initiale).

Fréquences de piégeage

Il existe différentes méthodes pour mesurer les fréquences de piégeage *in situ*, telles que la mesure par chauffage paramétrique [Savard et al., 1997] ou par oscillations "forcées". C'est cette dernière méthode que nous utilisons pour caractériser les fréquences du piège dipolaire. Elle consiste à mesurer les oscillations du nuage dans le piège suite à une augmentation brutale de l'intensité du faisceau. La position du nuage oscille alors à la fréquence du piège

ω_T tandis que son rayon oscille à $2\omega_T$, appelé mode de "respiration" [Pitaevskii, 1996]. Ce procédé est schématisé en Fig.2.19(a).

Afin de faire osciller le nuage, nous augmentons soudainement la puissance du faisceau dipolaire jusqu'à $P_0 = 3.22$ W en fin d'évaporation optique, pour ensuite imager les atomes à différents instants. Les mesures expérimentales de ces oscillations sont présentées en Fig.2.19(b). La taille horizontale (resp. verticale) σ_h (resp. σ_v) du nuage en fonction du temps t est ajustée avec une fonction de la forme

$$\sigma_{h/v}(t) = \sigma^{(0)}_{h/v} \sin\left(\omega_{h/v} t + \varphi_{h,v}\right) e^{-t/\tau_{h/v}} + \sigma^{(moy)}_{h/v}, \tag{2.21}$$

où $\sigma^{(0)}_{h/v}$ est l'amplitude des oscillations, $\omega_{h/v}$ la pulsation, $\varphi_{h,v}$ la phase à l'origine, $\tau_{h/v}$ le temps d'amortissement des oscillations et $\sigma^{(moy)}_{h/v}$ la taille moyenne du nuage.

Les ajustements des données par cette équation nous permettent de déduire les fréquences de piège dans les deux directions : $\omega_h/2\pi \simeq (727 \pm 14)$ Hz et $\omega_v/2\pi \simeq (706 \pm 4)$ Hz. Or, d'après nos notations, la direction verticale correspond à l'axe (Oz) et la direction horizontale est ici une combinaison des axes (Ox) et (Oy) en raison de la disposition du système d'imagerie (cf. Fig.2.3). Cependant, d'après notre discussion dans la première partie de cette section, la fréquence de piège selon l'axe (Oy) est très faible comparée à celle selon (Ox) (cf. Tableau 2.3). Par conséquent nous pouvons faire l'approximation suivante : $\omega_h \equiv \omega_x$, soit finalement, $\omega_x^{exp} \simeq 2\pi \cdot 727$ Hz et $\omega_z^{exp} \simeq 2\pi \cdot 706$ Hz. Ces résulats sont en adéquation avec les simulations théoriques pour cette configuration de piège : $\omega_x^{th} = 2\pi \cdot 717$ Hz et $\omega_z^{th} \simeq 2\pi \cdot 715$ Hz (voir Tableau 2.3). Nous présentons également en Fig.2.19(c) les mesures de la position verti-

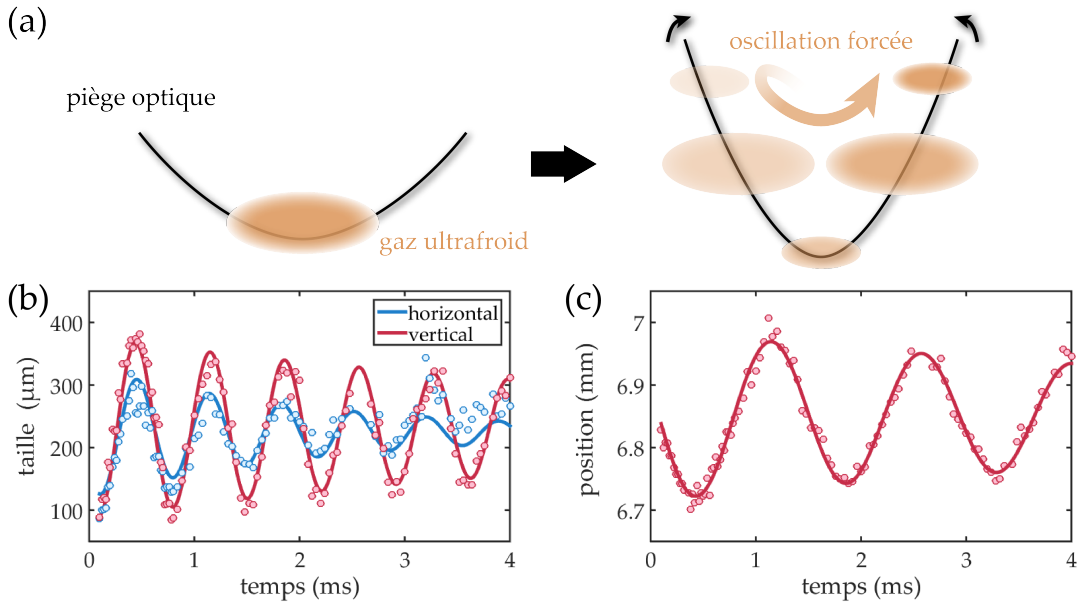


FIGURE 2.19 – **Oscillations de la taille et de la position du nuage d'atomes froids.** (a) Schéma du principe de la mesure des fréquences de piège par oscillations forcées : le gaz d'atomes ultrafroids est piégé dans un potentiel optique dont on augmente soudainement la puissance. La position du nuage atomique oscille alors à la fréquence du piège ω_T tandis que sa taille oscille à $2\omega_T$. Les mesures expérimentales permettent d'obtenir (b) la taille et (c) la position du nuage atomique. Ces deux évolutions sont ajustées par une fonction du type (2.21) dont les paramètres donnent les fréquences de pièges suivantes : (b) $\omega_h/2\pi \simeq (727 \pm 14)$ Hz et $\omega_v/2\pi \simeq (706 \pm 4)$; (c) $\omega_v/2\pi \simeq (700 \pm 5)$.

cale du nuage en fonction du temps, qui oscille quant à elle à la fréquence du piège, comme mentionné précédemment. Ainsi un ajustement similaire à (2.21) nous permet de déduire une fréquence de piège d'environ 700 Hz, ce qui est cohérent avec la première estimation.

La taille du faisceau focalisé au centre de la cavité a également été estimé en mesurant les fréquences de piège pour différentes valeurs de puissance optique. Ces données sont

présentées en Fig.2.20 et nous permettent d'en déduire le *waist* w_0. En effet, le potentiel dipolaire crée par l'interaction d'un atome avec un faisceau gaussien de rayon $w(y)$ est donné par la relation suivante [Grimm et al., 2000] :

$$U_{dip}(x,y,z) = U_0(y) e^{-2\frac{(x^2+(z-\delta_{pos})^2)}{w^2(y)}} = -\frac{-3\pi c^2\Gamma_0}{2\omega_0^3}\left(\frac{1}{\omega_0-\omega}+\frac{1}{\omega_0+\omega}\right)\frac{2P_0}{\pi w^2(y)} e^{-2\frac{(x^2+(z-\delta_{pos})^2)}{w^2(y)}}, \quad (2.22)$$

avec ω_0 la fréquence de transition atomique, ω la fréquence laser, P_0 la puissance optique, $w(y) = w_0\sqrt{1+(y/y_R)^2}$ la largeur du faisceau avec w_0 le rayon du faisceau au point focal et y_R la distance de Rayleigh. Par ailleurs, la fréquence de piège dans la direction i (x,y ou z) est définie par

$$\omega_i = \sqrt{\frac{1}{m}\left|\frac{\partial^2 U_{dip}}{\partial^2 i}\right|_{r=r_0}}, \quad (2.23)$$

avec la masse de l'atome m et $r_0 = (0,0,\delta_{pos})$ la position de référence du piège dipolaire (centre du piège). Ainsi, en insérant (2.22) dans (2.23), nous pouvons en déduire l'expression de la fréquence de piège dans la direction verticale (*i.e.*, selon (Oz)) en fonction de la puissance :

$$\omega_z = \sqrt{\frac{1}{m}\left|U_0(0)\frac{-4}{w^2(0)}\right|} = \alpha\sqrt{P_0}, \quad (2.24)$$

où nous avons posé le paramètre

$$\alpha = \left[\frac{12c^2\Gamma_0}{m\omega_0^3 w_0^4}\left|\frac{1}{\omega_0-\omega}+\frac{1}{\omega_0+\omega}\right|\right]^{1/2}. \quad (2.25)$$

Ce paramètre est déduit de l'ajustement des données par une fonction de la forme (2.24) (voir Fig.2.20), soit ici $\alpha = 2\pi\cdot(387\pm10)$ Hz.W$^{-1/2}$, ce qui donne, d'après (2.25), un *waist* au point de focalisation $w_0 \simeq (49.8\pm0.7)\ \mu m$.

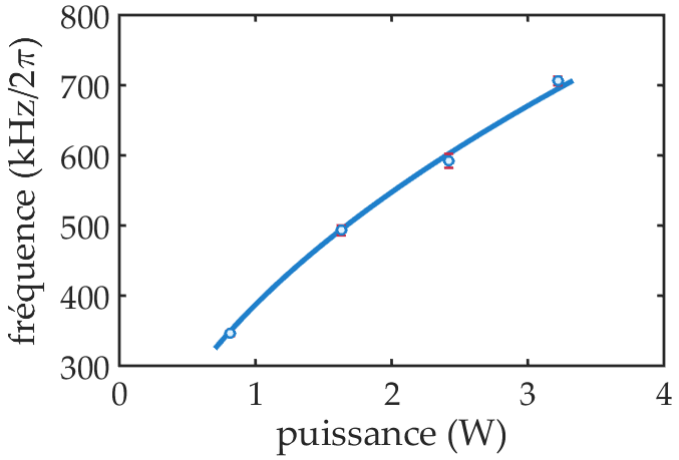
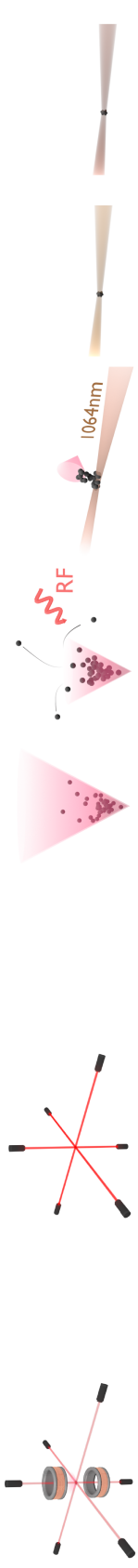


FIGURE 2.20 – **Evolution de la fréquence de piège dans la direction verticale en fonction de la puissance optique.** Un ajustement des oscillations pour chaque valeur de la puissance optique P_0 permet de déduire la fréquence de piège dans la direction verticale ω_z (points bleus) avec leurs barres d'incertitudes (rouge), dont l'évolution est ajustée avec une fonction de la forme (2.24) (trait bleu).

2.2.6 Résumé de la séquence

Dans la Fig.2.21 en page suivante, nous récapitulons la séquence expérimentale que nous avons détaillée précédemment accompagnée des résultats. Celle-ci nous a permis d'atteindre le régime de dégénérescence quantique en 15 secondes environ.



	MOT 3D	CMOT	mélasse optique	dépompage	piège magnétique	évaporations RF	piège hybride	évaporation 1	évaporation 2
N	**2×10^9**	2×10^9	2×10^9	2×10^9	5×10^8	**6×10^7**	2×10^7	5×10^6	3.7×10^6
T (μK)	**469**	121	**39**	44	150	**34**	27	**2.8**	**0.88**
n (at/cm^3)	7.7×10^{10}	6.2×10^{11}	4.2×10^{11}	4×10^{11}	3.9×10^{11}	6.3×10^{11}		5.4×10^{11}	1.4×10^{12}
ρ_{PSD}	**5×10^{-8}**	3×10^{-6}	**1×10^{-5}**	9×10^{-6}	3.5×10^{-7}	**2×10^{-5}**		**7.7×10^{-4}**	**1.1×10^{-2}**

FIGURE 2.21 – **Résumé de la séquence expérimentale de refroidissement.** Les paramètres de la première colonne sont : le nombre d'atomes (N), la température (T), la densité atomique (n) et la densité dans l'espace des phases (ρ_{PSD}).

A l'heure actuelle, la mise en place du nouveau système d'imagerie sub-longueur d'onde (discutée dans la partie 2.5) nous a poussé à devoir ré-optimiser la séquence afin d'obtenir de nouveau un BEC. La séquence de refroidissement suit le même procédé que celui décrit ci-dessus à quelques modifications près : dorénavant les atomes sont pompés optiquement avant le chargement dans un piège magnétique afin de maximiser la quantité d'atomes piégés (45% contre 23% avant optimisation). Par ailleurs, nous n'avons pas pu obtenir un transfert du piège hybride après évaporations RF aussi efficace qu'auparavant. En effet, seulement 5% des atomes étaient chargés dans le piège dipolaire. A présent, le transfert se fait du piège magnétique vers un piège dipolaire croisé, nous permettant d'atteindre des nombres d'atomes semblables à ceux présentés plus hauts.

Dans la section suivante, nous aborderons la dernière partie de la séquence expérimentale où nous discuterons notamment de la dernière étape de l'évaporation optique qui nous a permis d'atteindre le régime de condensation et nous caractériserons ce nuage.

2.3 Condensat de Bose-Einstein : caractérisation expérimentale

Comme nous l'avons vu dans la partie précédente, nous réalisons 4 rampes pour l'évaporation optique d'une durée totale de 4 s où la puissance passe de 3.2 à 70 mW. Plusieurs critères expérimentaux sont utilisés pour justifier l'observation d'un BEC [Durfee and Ketterle, 1998] : (1) augmentation soudaine de la densité optique, (2) densité du nuage en double structure (cf. Chapitre 1, Section 1.1.2), (3) une température T inférieure à la température de transition T_c (cf. Chapitre 1,Section 1.1.2) et (4) une inversion d'ellipticité. Dans ce qui suit nous allons discuter des trois premiers points.

Nous précisons que la caractérisation quantitative n'a pu être réalisée en raison des limites du système d'imagerie discuté en Section 2.1.3. En effet, la taille du condensat étant très faible à temps courts, nous observons la tache de diffraction du système imagerie rendant la caractérisation du BEC inexploitable, comme le montre la Fig.2.22 présentant l'image du nuage ultrafroid après un temps de vol de 6 ms.

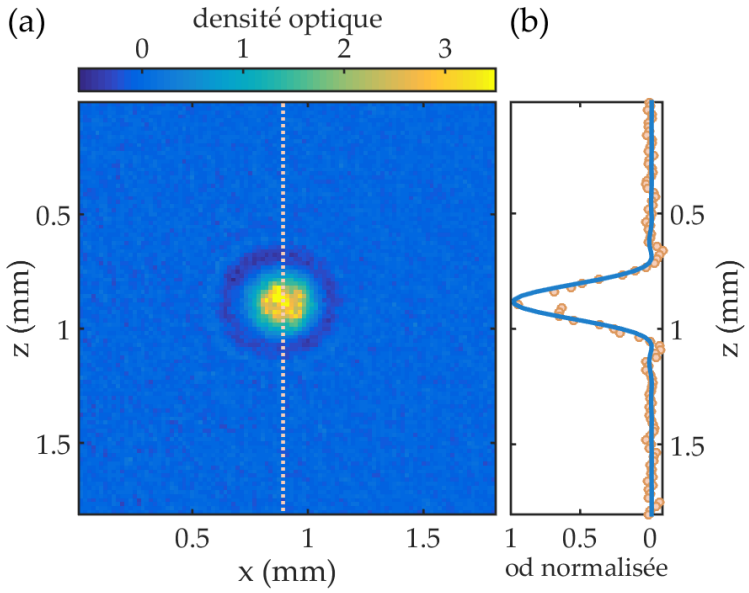


FIGURE 2.22 – **Limites du système d'imagerie sur le condensat.** (a) L'image bidimensionnelle du condensat à court temps de vol (6 ms) donne la tache de diffraction du système d'imagerie. Le trait pointillé correspond (b) au profil unidimensionnel (cercles oranges) normalisé à la valeur maximale de la densité optique (od). Avec l'ajustement par une fonction de Bessel (trait bleu), on trouve une ouverture numérique ON ≃ 0.0028.

2.3.1 Augmentation de la densité optique

Le premier critère auquel nous nous intéressons est l'augmentation soudaine de la densité optique dans le nuage. Ainsi, nous mesurons la densité du BEC pour différentes valeurs de puissance en fin d'évaporation optique. Nous reportons les valeurs en Fig.2.23 et nous observons un changement autour de 70 mW, valeur en dessous de laquelle la densité optique augmente plus rapidement lorsque la puissance est diminuée, signe d'une évaporation efficace. Nous avons donc ici le premier signe expérimental d'un condensat.

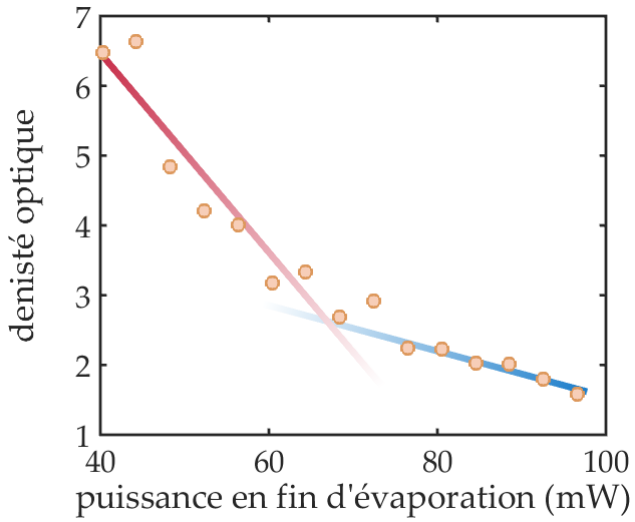


FIGURE 2.23 – **Évolution de la densité optique du gaz ultrafroid en fonction de la puissance en fin d'évaporation optique.** La puissance optique de la dernière rampe d'évaporation est diminuée. Dans un premier temps la densité optique (cercles oranges) suit une certaine tendance (symbolisée par le trait bleu), puis autour de 70 mW, celle-ci augmente de manière plus importante et plus rapide (rouge), signe d'une évaporation efficace et de l'entrée dans le régime de condensation.

2.3.2 Double structure

A présent, nous réalisons une image du BEC à un temps de vol suffisamment long pour ne pas être complètement limité par le système d'imagerie. Ainsi en se plaçant à une puissance de fin de rampe de 75 mW nous obtenons l'image du condensat présentée en Fig.2.24(a), où nous devinons alors un halo diffus autour d'une tache plus dense. Cela se confirme lorsque nous traçons le profil unidimensionnel de cette image, en Fig.2.24(b), et que nous ajustons ce résultat par deux types de fonction : la première est une gaussienne qui s'ajuste bien aux bords du nuage et la seconde est une fonction de Bessel (profil de la tache de diffraction) qui correspond à la partie centrale du nuage. Nous retrouvons ici un profil en double structure, similaire à celui que nous avons abordé dans la partie 1.1.2 du Chapitre 1. La fonction gaussienne décrit alors la fraction thermique du nuage tandis que la fonction de Bessel décrit la fraction condensée limitée par la diffraction. Nous avons donc ici un second argument pour justifier l'obtention du condensat.

2.3.3 Estimation de la température du nuage

Nous allons maintenant nous intéresser à la température du gaz d'atomes ultrafroids. Pour cela nous réalisons un premier calcul pour estimer la température. En raison des limites rencontrées avec le système d'imagerie, nous allons définir des bornes inférieure et supérieure pour la température mesurée, correspondant à une sous-estimation et une surestimation, respectivement.

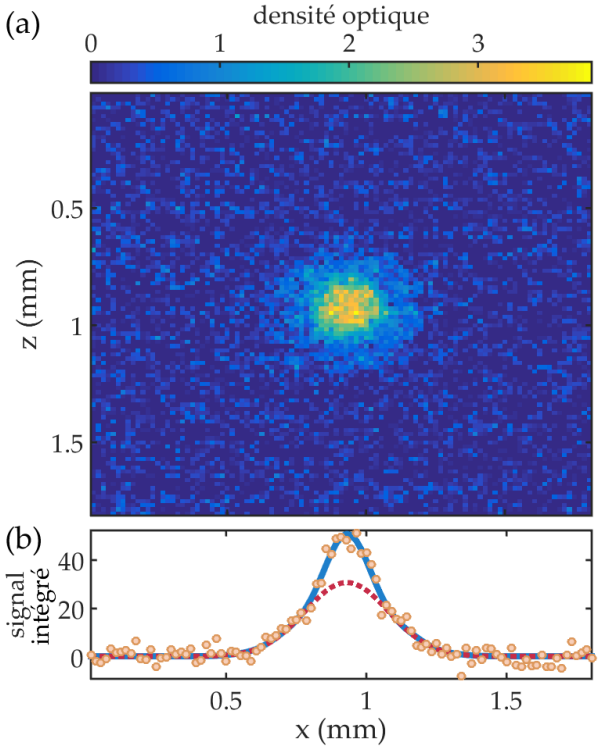


FIGURE 2.24 – **Observation d'une double structure dans le profil du condensat.** (a) Sur l'image du condensat après un temps de vol de 25 ms, on observe une double structure avec une densité plus importante au centre. (b) La densité de colonne selon x (somme de la densité optique sur z) nous donne un profil uni-dimensionnel (cercles oranges) dont les bords du nuage s'ajustent avec une fonction gaussienne (trait pointillé rouge) qui décrit la fraction thermique du condensat. La somme de cette fonction gaussienne et d'une fonction de Bessel (profil de la PSF) permet d'ajuster la densité totale (trait plein bleu). La fonction de Bessel décrit la fraction condensée du BEC.

Borne inférieure

Comme nous avons pu le voir, la résolution du système d'imagerie est limitée, ainsi pour déterminer la borne inférieure nous devons supprimer les effets de la PSF. Pour cela nous définissons une taille effective du nuage telle que

$$\sigma_{eff} = \sqrt{\sigma^2 - \sigma^2_{\mathrm{PSF}}}, \tag{2.26}$$

avec σ la largeur déduite par un ajustement gaussien après temps de vol (cf. (2.13)) et σ_{PSF} la largeur de la tache de diffraction déduite de la déconvolution d'un ajustement par une fonction gaussienne à temps courts (cf. Fig.2.22). Dans ce cas de figure, nous sous-estimons la taille du nuage, et si nous nous référons à l'équation (2.13), cela signifie que nous sous-estimons également la température. De cette façon nous pouvons déduire la borne inférieure T_{min} représentée en bleu sur la Fig.2.25(a).

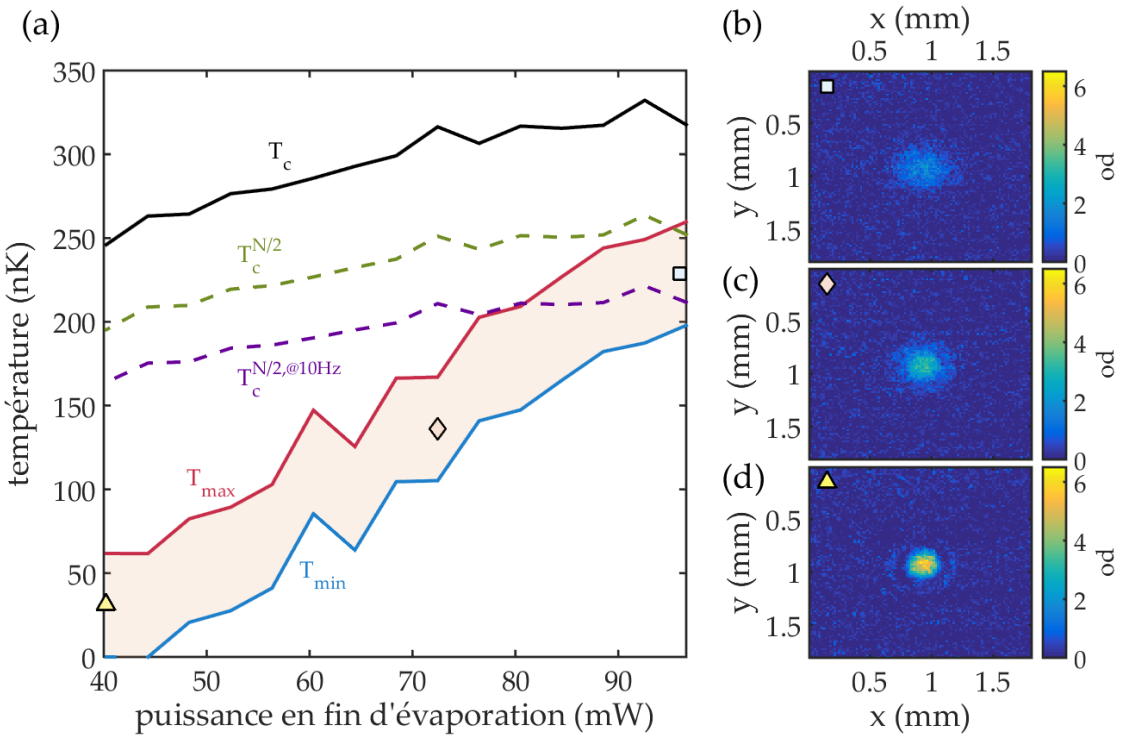


FIGURE 2.25 – **Estimation des températures mesurées et critiques.** (a) La température expérimentale est tracée (zone orangée) en fonction de la puissance en fin d'évaporation optique. Cette température est bornée entre deux limites déduites des mesures expérimentales (voir texte) : la borne minimale T_{min} (bleu) est déterminée en soustrayant du profil du nuage celui de la PSF tandis que la borne maximale T_{max} (rouge) est calculée en prenant la taille initiale du nuage nulle. Nous comparons cette mesure à la température critique T_c (noir) calculée à partir de nos estimations sur le nombre d'atomes et les fréquences de piége (cf. équation (2.27)). Cette température est également estimée dans le cas où le nombre d'atomes N serait divisé par deux (trait pointillé vert) et où la fréquence du piège selon (Oy) serait égale à 10 Hz au lieu de 28 Hz (trait pointillé violet). Ces estimations ont été réalisées en raison des limites du système d'imagerie avec lequel nous n'avons pas pu effectuer de mesures quantitatives. Les symboles correspondent à différentes valeurs de puissances dont les profils des nuages sont présentés à droite du graphique : (b) pour $P_0 = 96$ mW on observe un nuage thermique, (c) pour $P_0 = 73$ mW on observe un profil en double structure, signe d'une entrée dans le régime de dégénérescence quantique ce qui se confirme avec la température expérimentale estimée en deçà de la température critique, enfin (d) pour $P_0 = 40$ mW on observe la tache de diffraction du dispositif d'imagerie en raison des limites de sa résolution.

Borne supérieure

Pour déterminer cette borne nous négligeons la taille initiale du nuage, soit $\sigma_0 = 0$ dans l'expression (2.13). De plus la taille σ_{PSF} est également négligée à temps long. Par conséquent, cette sous-estimation de la taille initiale et la sur-estimation de la taille du nuage σ après temps de vol engendrent une sur-estimation de la température. Cela nous permet de calculer la borne supérieure T_{max} tracée en rouge en Fig.2.25(a).

Nous avons donc une température expérimentale qui s'étend entre les limites définies par T_{min} et T_{max}, représentée par la zone orangée en Fig.2.25(a).

Température critique

Pour définir le régime dans lequel nous nous trouvons, il faut comparer la température mesurée avec la température critique T_c définie lors du passage dans la limite thermodynamique dans le Chapitre 1 et donnée par l'expression (1.14), que nous rappelons ici :

$$T_c \simeq 0.94 \frac{\hbar \left(\omega_x \omega_y \omega_z\right)^{1/3}}{k_B} N^{1/3}. \tag{2.27}$$

Pour estimer cette température il faut ainsi connaître les fréquences de piégeages dans les différentes directions, calculées en fin de Section 2.2.5, et le nombre d'atomes dans le nuage, calculé à partir des images par absorption d'après l'expression (2.6). A partir de ces précédents résultats nous estimons T_c, dont l'évolution en fonction de la puissance en fin d'évaporation optique est tracée en Fig.2.25(a).

Expérimentalement nous observons une transition autour d'une puissance en fin d'évaporation $P_0 \simeq 80$ mW, or nous constatons ici que la température mesurée est toujours en deçà de T_c. L'estimation de cette température critique qui dépend fortement des fréquences de piège et du nombre d'atomes peut être erronée si ces premières sont mal estimées ou si ce dernier est mal calibré (nous verrons dans la dernière partie une mesure pour calibrer le nombre d'atomes de manière absolue). Ainsi pour illustrer l'influence de ces paramètres, nous avons tracé T_c pour deux configurations : dans la première nous réalisons l'hypothèse que le nombre d'atomes serait en réalité moitié moins, soit $N \equiv N/2$ dans (2.27) ce qui serait le cas pour une polarisation circulaire $\sigma+$ du faisceau à la place d'une polarisation considérée isotrope (trait pointillé vert) ; puis dans la seconde, nous supposons toujours que $N \equiv N/2$ et nous considérons un décalage du piège dipolaire $\delta_{pos} = 500$ µm ce qui donne $\omega_y = 2\pi \cdot 10$ Hz (au lieu de 28 Hz pour 70 µm), tracée en Fig.2.25(a) (pointillés violet).

En diminuant l'estimation de T_c, ces nouvelles hypothèses nous rapprochent de notre observation expérimentale, *i.e.*, la température du gaz ultrafroid est inférieure à la température critique lorsque la puissance en fin d'évaporation est inférieure à 80 mW.

2.3.4 Estimation du temps de vie

Nous pouvons réaliser une estimation du temps de vie du condensat en mesurant le nombre d'atomes au sein du nuage atomique en fonction du temps. Cette mesure est présentée en Fig.2.26. Pour connaître l'influence des collisions à trois corps sur le temps de vie du condensat, nous calculons le taux de pertes à trois corps dans le nuage qui est donné par [Burt et al., 1997]

$$\Gamma_3 = K_3 n_{TF}(0)^2, \tag{2.28}$$

où $K_3 = 1.8 \times 10^{-29}$ cm^6.s^{-1} [Söding et al., 1999] et $n_{TF}(0)$ est la densité au centre du nuage dans l'approximation de Thomas-Fermi (décrite en section 1.1.4 du Chapitre 1). D'après (1.25), cette dernière est définie par $n_{TF}(0) = \mu/g$, avec la constante de couplage $g = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ et

le potentiel chimique que l'on peut écrire $\mu = \hbar\bar{\omega}\,(15Na_s/a_{oh})^{2/5}/2$, où nous rappelons que $a_s = 100a_0 \simeq 5.2$ nm tandis que la longueur caractéristique de l'oscillateur harmonique est donnée par $a_{oh} = \sqrt{\hbar/(m\bar{\omega})}$. Ainsi la densité au centre s'écrit

$$n_{\mathrm{TF}}(0) = \frac{15^{2/5}\sqrt{\pi}}{8}\left(\frac{a_{oh}}{a_s N}\right)^{3/5} n_{\mathrm{BEC}}(0), \tag{2.29}$$

où nous avons utilisé l'expression de la densité au centre pour un condensat $n_{\mathrm{BEC}}(0) = N\,(m\bar{\omega}/(\pi\hbar))^{3/2}$ (cf. relation (1.16)).

Pour le nuage présenté en Fig.2.24 (correspondant également à la configuration représentée par un losange en Fig.2.25), nous avons $N \simeq 1.9 \times 10^6$ avec une fréquence de piège $\bar{\omega} \simeq 2\pi \cdot 57$ Hz et une température estimée à $T \simeq 136$ nK. Ces paramètres permettent de calculer le taux de perte (2.28), soit $\Gamma_3 \simeq 2.6\ \mathrm{s}^{-1}$. Les phénomènes de perte par collisions à trois corps se déroulent donc sur des échelles de temps de l'ordre de $\tau_3 = \Gamma_3^{-1} \simeq 0.4$ s. En observant l'évolution temporelle du nombre d'atomes qui décroit au sein du condensat (en Fig.2.26), nous observons en effet deux lois d'échelles. Les premiers points évoluent sous l'influence des pertes à trois corps, sur quelques secondes. Nous précisons que le calcul précédent nous a permis d'estimer le temps caractéristique de ces pertes au centre du nuage, tandis que les mesures présentées ici sont en réalité une moyenne sur tout le nuage. Pour identifier le temps de vie du BEC, nous ajustons les données par une exponentielle à partir de 7 s, valeur pour laquelle nous considérons que les pertes par collision à trois corps sont négligeables. Ainsi, un ajustement par une exponentielle nous donne un temps de vie de l'ordre de 15 s, proche des temps de vie du MOT (cf. Fig.2.9) et du piège magnétique (cf. Fig.2.15). Ce temps est *a priori* suffisant pour la suite du projet.

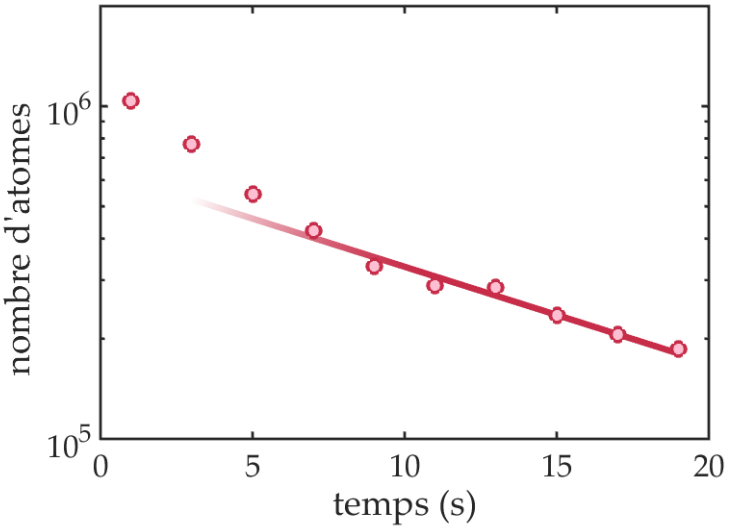


FIGURE 2.26 – **Estimation du temps de vie du BEC.** La mesure du nombre d'atomes dans le condensat nous permet de remonter au temps de vie du BEC. Nous présentons ici le logarithme du nombre d'atomes mesuré en fonction du temps. Un ajustement exponentiel des derniers points nous permet de déterminer le temps de vie suivant : $\tau_{vie,\mathrm{BEC}} \simeq (15.0 \pm 3.5)$ s.

2.4 Calibration du nombre d'atomes

Dans la partie précédente, nous avons pu voir qu'il était important de connaître le nombre d'atomes au sein de nuage afin d'avoir une bonne caractérisation du condensat. Ainsi il est nécessaire de calibrer ce nombre de manière absolue. Pour cela, nous avons utilisé une méthode d'imagerie à forte saturation.

2.4.1 Effets de saturation sur le nuage atomique

Nous considérons un atome à deux niveaux, notés $|g\rangle$ et $|e\rangle$, séparés d'une fréquence ω_{eg}. Le taux de désexcitation de l'état excité est donné par Γ_0, où Γ_0^{-1} est la durée de vie du niveau excité. Pour un laser de fréquence ω désaccordé d'une quantité $\delta = \omega - \omega_{eg}$ de la transition atomique, le taux de diffusion en fonction de l'intensité I s'écrit [Metcalf and van der Straten, 2003]

$$\Gamma = \frac{\Gamma_0}{2}\frac{s}{1+s} = \frac{\Gamma_0}{2}\frac{I/I_{sat}}{1+(2\delta/\Gamma_0)^2+I/I_{sat}}, \tag{2.30}$$

avec le paramètre de saturation

$$s = \frac{I/I_{sat}}{1+(2\delta/\Gamma_0)^2}. \tag{2.31}$$

Nous avons posé $\Omega = \mathbf{d}\cdot\mathbf{E}/\hbar$ la pulsation de Rabi. L'intensité de saturation I_{sat} dépend de l'espèce atomique, de la transition considérée et de la polarisation du laser ($I_{sat} \simeq 2.5$ mW/cm^2 pour la transition $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}$ du ^{87}Rb en polarisation linéaire). Nous constatons qu'il existe une valeur maximale du taux de diffusion (2.30) lorsque $s \rightarrow \infty$, donnée par $\gamma_0/2$. L'atome ne peut diffuser qu'un nombre limité de photons par seconde, on appelle cela le phénomène de saturation.

La puissance rayonnée par l'atome est donnée par $P = \sigma I$ avec la section efficace de diffusion notée σ. Cette dernière est définie telle que $\hbar\omega/\sigma I = \Gamma$, soit d'après (2.30),

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1+(2\delta/\Gamma_0)^2+I/I_{sat}} \tag{2.32}$$

avec

$$\sigma_0 = \frac{\hbar\omega\Gamma_0}{2I_{sat}}. \tag{2.33}$$

Nous constatons alors que la saturation du taux de diffusion pour des fortes intensités entraîne une décroissance de la section efficace de diffusion.

L'expression (2.3) utilisée précédemment était valable lorsque $I/I_{sat} << 1$, *a contrario* ici, nous souhaitons réaliser des images par absorption où cette condition n'est pas forcément respectée, comme nous le verrons dans la suite, ainsi nous utilisons l'expression de la section efficace donnée par (2.32).

2.4.2 Loi de Beer-Lambert

Considérons une tranche de matière comprise entre y et $y+dz$. L'échantillon est caractérisé par un nombre d'atomes n et une section efficace de diffusion par atome $\sigma(\delta, I)$. Comme nous l'avons vu avec l'expression (2.1) dans la section 2.1.3, l'équation de Beer-Lambert caractérisant l'atténuation de l'onde laser incidente (selon Oy) est donnée par

$$\frac{dI}{dy} = -n\sigma(\delta, I)I. \tag{2.34}$$

A résonance, d'après l'expression de la section efficace (2.32) nous avons

$$\frac{dI}{dy} = -n\frac{\sigma_0}{1+I/I_{sat}}I \tag{2.35}$$

Nous souhaitons ici calibrer le nombre d'atomes, ainsi il faut prendre en compte les corrections dues aux imperfections sur la polarisation du faisceau d'imagerie ou bien la présence de champs magnétiques résiduels. Pour cela nous introduisons une intensité de saturation effective $I_{sat}^{eff} = \alpha^* I_{sat}$, avec $I_{sat} = 2.5$ mW/cm^2 et α^* le facteur de correction que nous cherchons à déterminer. L'équation (2.35) devient alors

$$\frac{dI}{dy} = -n\frac{\sigma_0^{eff}}{1+I/I_{sat}^{eff}}I, \tag{2.36}$$

où $\sigma_0^{eff} = \sigma_0/\alpha^*$, avec σ_0 définie par (2.33). Nous pouvons ainsi réécrire (2.36) tel que

$$\alpha^* \frac{dI}{I} + \frac{dI}{I_{sat}} = -\sigma_0 n(x,y,z)dy. \tag{2.37}$$

En intégrant cette expression nous trouvons

$$\alpha^* \delta_0(x,z) + \frac{I_i(x,z) - I_f(x,z)}{I_{sat}} = f(x,z;\alpha^*), \tag{2.38}$$

où nous définissons la profondeur optique (cf. (2.5)) telle que

$$od(x,z) \equiv f(x,z;\alpha^*) = \sigma_0 \int n(x,y,z)dy \tag{2.39}$$

et la densité optique telle que

$$\delta_0(x,z) = -\ln\left(\frac{I_f(x,z)}{I_i(x,z)}\right). \tag{2.40}$$

C'est cette dernière expression qui était utilisée pour la caractérisation des images par absorption de la séquence expérimentale de refroidissement, où nous avons en réalité $od(x,z) \equiv \delta_0(x,z)$ pour reprendre les mêmes notations (voir formule (2.5)).

Principe

La calibration du nombre d'atomes est réalisée d'après la méthode décrite dans [Reinaudi et al., 2007] dont le principe repose sur une imagerie par absorption d'un nuage dense avec une forte saturation de la transition atomique. L'imagerie par absorption à basse intensité, couramment utilisée, n'est pas adaptée pour les nuages très denses [Ketterle et al., 1999]. En effet, extraire la densité optique d'une telle image pour un faisceau d'imagerie à résonance s'avère très difficile, et pour un faisceau hors-résonance ($\delta \neq 0$ dans (2.32)) la partie réelle de la susceptibilité devient non-nulle assimilant le nuage atomique à une lentille qui réfracte la lumière. Pour des nuages denses il est toujours possible de tirer profit de la réduction de la section efficace, non plus avec le désaccord laser mais avec l'intensité du faisceau, en particulier lorsque $I/I_{sat}^{eff} >> 1$. En effet, d'après (2.38) il suffit de connaître les intensités incidente I_i et finale I_f afin de remonter à la valeur de la profondeur optique od.

La méthode consiste donc à envoyer des impulsions lasers sur les atomes dont l'intensité varie sur au moins deux ordres de grandeur, afin de s'assurer de balayer les deux régimes d'imagerie par absorption à basse et haute intensités. Le temps de l'impulsion est déterminé en fonction de l'intensité correspondante de manière à ce que le nombre de photons absorbés par les atomes ne soit pas trop élevé pour éviter le chauffage ou des effets mécaniques sur le nuage *via* la pression de radiation. Ce dernier est imagé par absorption puis l'analyse se fait en traçant la densité optique (2.38) pour différentes valeurs du paramètre α^*. Puisque $od(x,z)$ ne dépend que des propriétés du nuage atomique et non de l'intensité incidente, la valeur de α^* que l'on cherche est celle pour laquelle la densité optique est constante. En pratique, on obtient l'optimum en déterminant le minimum de la déviation standard de $od(x,z)$ en fonction de α^*.

Nombre de photons diffusés

La puissance absorbée par les atomes est donnée par

$$P_{abs} = \sigma I_i, \tag{2.41}$$

avec I_i l'intensité incidente. Ainsi, si nous envoyons une impulsion d'intensité I_i pendant un temps τ_p, le nombre de photons absorbés est défini par

$$N_{\gamma,abs} = \frac{P_{abs}}{\hbar\omega_0}\tau_p = \frac{\Gamma_0}{2}\frac{s}{1+s}\tau_p, \tag{2.42}$$

où nous avons utilisé les expressions (2.41), (2.32), (2.33) et (2.31). Nous souhaitons balayer l'intensité du faisceau telle que $s \in [1/15, 15]$, d'après (2.42) cela signifie que si nous voulons environ 30 photons absorbés par atome en moyenne, les durées d'impulsions maximale et minimale sont $\tau_p \in [4.2\ \mu s, 280\ ns]$.

Dispositif expérimental

Le montage expérimental utilisé pour cette mesure est schématisé en Fig.2.27. Un générateur d'impulsion permet d'envoyer des impulsions courtes sur l'interrupteur de l'AOM diffractant ainsi le faisceau d'imagerie pendant un temps τ_p qui est ensuite injecté dans une fibre optique (non montré sur le schéma). Ensuite le faisceau d'imagerie suit le même chemin que le faisceau dipolaire (non utilisé ici) en étant collimaté par le télescope composé de deux lentilles de focales $f' = 100$ et $f' = 150$. Ces optiques sont donc optimisées pour travailler à 1064 nm et non à la longueur d'onde du laser d'imagerie (780 nm). Ainsi nous déterminons les pertes optiques induites par la lentille proche de la chambre de sciences, notamment pour calculer l'intensité incidente sur les atomes comme nous le verrons ci-après, et nous trouvons une transmission $T_{1064} \simeq 63.5\%$. Finalement après traversée de la chambre à vide et du nuage atomique, le faisceau est focalisé sur une caméra CDD à multiplication d'électrons (EMCCD), idéal pour mesurer de faibles flux de lumière. Cette dernière est le modèle LUCA R du groupe Andor™ avec un capteur de résolution 1004×1002 pixels de taille $8\mu m \times 8\mu m$.

En sortie de cette fibre, une partie du faisceau est prélevée en transmission d'un miroir puis focalisée sur une photodiode. Cette étape est cruciale car elle nous permet d'obtenir le profil des impulsions afin de calculer l'intensité réelle incidente sur les atomes (voir Fig.2.27(b)). En effet, la diffraction du faisceau par l'AOM dépend de la température de ce dernier, ainsi la puissance en sortie peut varier selon le temps de l'impulsion et s'écarter des prévisions théoriques. Cela signifie que les valeurs des intensités et des durées d'impulsion données plus haut ne sont qu'une première estimation et ne correspondent pas forcément aux valeurs expérimentales, qui seront ainsi recalculées pour chaque impulsion afin d'avoir l'intensité réellement envoyée sur les atomes.

■ **Séquence expérimentale**

Pour réaliser cette mesure nous générons un MOT comprimé (CMOT) avec $\sim 6 \times 10^6$ atomes que nous laissons chuter pendant un temps de vol d'environ 4 ms pour obtenir une densité optique autour de 2 (ceci afin de garantir la validité de l'imagerie par absorption à basse intensité). Le nuage est alors imagé de manière similaire à la séquence utilisée pour le précédent système d'imagerie décrite dans la partie 2.1.3, *i.e.*, trois images sont prises successivement pour avoir $I_i(x,z) = I_{wo}(x,z) - I_{fond}(x,z)$ et $I_f(x,z) = I_w(x,z) - I_{fond}(x,z)$. Les profils bidimensionnels de ces intensités incidente et finale sont présentés en Fig.2.27(c) pour une impulsion d'une durée $\tau_p \simeq 1.42$ µs avec $s \simeq 5.68$. Pour moyenner nos résultats, nous réalisons 6 mesures pour chaque valeur de $s = I_i/I_{sat}$.

■ **Calibration de la photodiode**

Pour estimer l'intensité correspondante il faut donc calibrer la tension de la photodiode en fonction de la puissance. Pour cela nous mesurons simplement la puissance au point de focalisation du télescope (sur laquelle le facteur de transmission de la lentille T_{1064} est

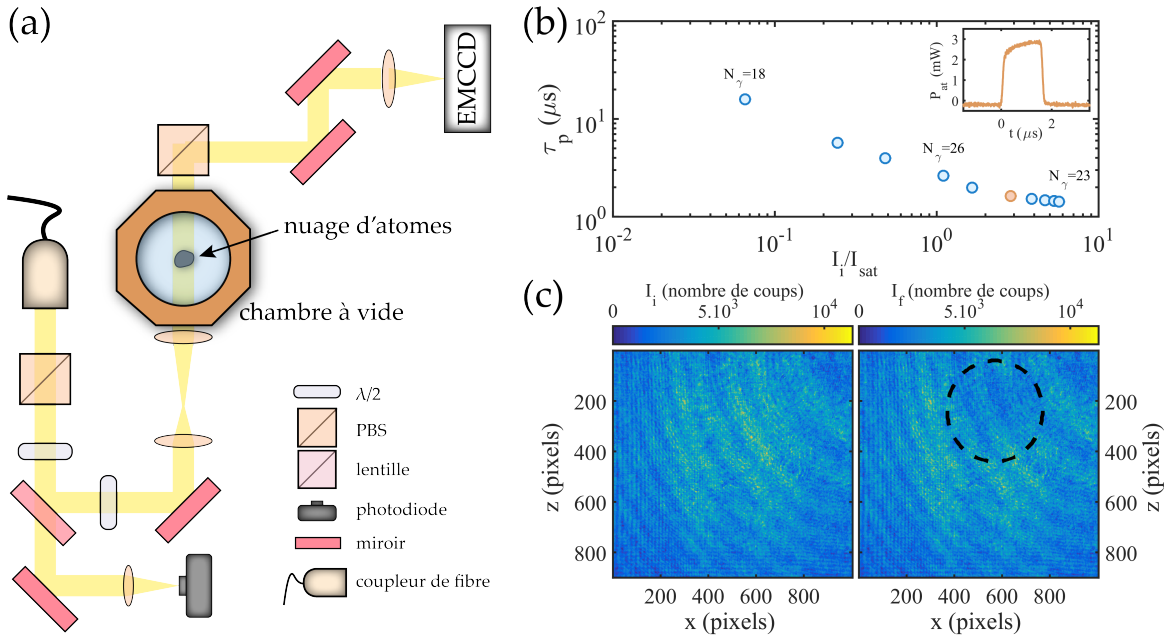


FIGURE 2.27 – **Montage expérimental pour la calibration du nombre d'atomes.** (a) Schéma du dispositif expérimental utilisé pour la mesure du nombre d'atomes. Les impulsions laser sont injectées dans une fibre (non montré ici) puis traversent un cube polariseur et une première lame demi-onde pour polariser linéairement le faisceau. La lame est réglée afin de transmettre une faible quantité du faisceau à travers un miroir qui est ensuite focalisé sur une photodiode. La quantité réfléchie est optimisée *via* une seconde lame demi-onde afin d'optimiser la réflexion du faisceau sur le cube en sortie de chambre à vide. En effet, le laser est collimaté par un télescope pour sonder les atomes au centre de l'enceinte. Enfin le faisceau est focalisé sur une caméra CCD à multiplication d'électrons (EMCCD). (b) La durée des impulsions τ_p est variée en fonction de l'intensité envoyée I_i afin d'avoir un nombre de photons N_γ constant. Le profil des impulsions est analysé par le signal reçu sur la photodiode et permet de calculer l'intensité réelle à la position des atomes. (c) Trois images sont prises afin d'obtenir les profils bidimensionnels des intensités incidente I_i et finale I_f, pour une impulsion de 1.42 µs et s=5.68 ici. C'est sur le profil de I_f que l'on obtient le nuage d'atomes par absorption (mis en valeur ici par le cercle en pointillés).

appliquée) pour obtenir la puissance aux atomes ainsi que la tension correspondante affichée sur la photodiode. Cette mesure est réalisée avec le laser en continu et est présentée en Fig.2.28. La pente de l'ajustement linéaire nous permet d'avoir le facteur de conversion, soit ici $P_{at} = 1.65V_{PhD} + 0.03$ (avec la puissance P_{at} en mW et la tension V_{PhD} en V).

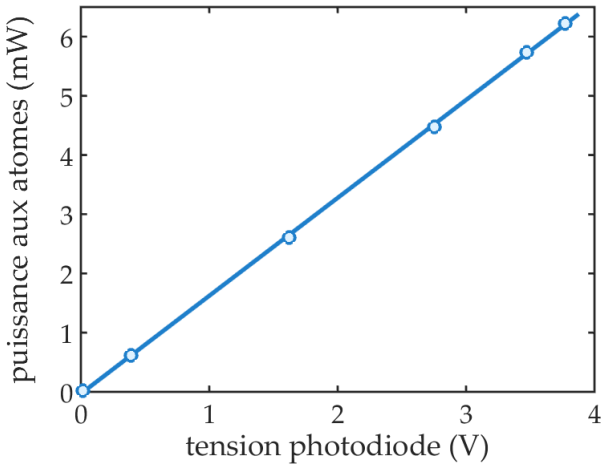


FIGURE 2.28 – **Calibration de la puissance aux atomes en fonction de la tension sur la photodiode.** Évolution de la puissance aux atomes en fonction de la tension affichée sur la photodiode. Un ajustement linéaire donne la relation entre la puissance aux atomes P_{at} et la tension V_{PhD}, soit $P_{at} = 1.65V_{PhD} + 0.03$.

■ Calibration de la caméra CCD à multiplication d'électrons

Nous avons dans un premier temps caractérisé les pertes optiques lorsque le faisceau part de la position du nuage jusqu'à la caméra, que nous évaluons à $T_{opt} \simeq 21\%$.

Ensuite nous avons évalué l'efficacité quantique de cette caméra qui vaut $\eta \simeq 46\%$ selon le constructeur. Pour cela nous avons généré un train d'impulsions avec un rapport cyclique de 1% (*i.e.*, une impulsion correspondant à un centième de la période du train d'ondes) que nous avons focalisé sur une tête de puissance afin d'en déduire le nombre de photons, puis sur la caméra pour avoir le nombre de photons convertis en électrons. Ces résultats sont reportés dans le Tableau 2.5 et nous donnent une efficacité quantique : $\eta_{exp} \simeq 16.9\%$. Cette valeur est très éloignée de la valeur théorique donnée plus haut. Nous avons réalisé la même mesure en doublant le rapport cyclique, afin de vérifier la cohérence des résultats (voir Tableau 2.5) et comme attendu le nombre de photons est à peu près doublé, et nous trouvons une efficacité proche de la première estimation, soit $\eta_{exp} \simeq 17.4\%$.

rapport cyclique	1%	2%
nombre de photons	1.43×10^9 (0.343 µW)	2.83×10^9 (0.723 µW)
nombre d'électrons	2.42×10^8	4.92×10^8
efficacité quantique	**16.9%**	**17.4%**

TABLEAU 2.5 – **Mesures de l'efficacité quantique de la caméra EMCCD.**

Nous avons également calibré le grandissement de la caméra de manière identique à la méthode présentée en fin de partie 2.1.3 en effectuant un temps de vol du piège dipolaire. Nous trouvons un grandissement $\gamma \simeq 2$.

Dans l'expression (2.38) de la profondeur optique, les intensités optiques I sont données en unités SI (W/m^2). Expérimentalement, nous n'avons pas directement accès à cette quantité mais au nombre de coups par pixel pour un temps d'exposition donné (I^{coups}). Les deux

quantités étant proportionnelles l'une à l'autre, le facteur de proportionnalité se simplifie dans le rapport du calcul à faible intensité et il est généralement ignoré. Ce n'est pas le cas pour une imagerie à forte intensité car il faut exprimer le rapport de l'expression (2.38) dans un système d'unité commun. En d'autres termes, il faut soit transformer $I_i - I_f$ en unités SI ou I_{sat} en nombre de coups par pixel par seconde. Nous choisissons ici la seconde solution. Théoriquement ce nombre de coups par pixel est défini par

$$I_{sat}^{coups} = \frac{\Delta_x \Delta_z}{\gamma^2} \frac{I_{sat}}{\hbar\omega_0} T_{opt} \eta G \tau_p, \tag{2.43}$$

avec l'énergie d'un photon $\hbar\omega_0$, le gain de la caméra G et les tailles d'un pixel Δ_x et Δ_z dans les directions horizontale et verticale, respectivement.

Expérimentalement ce nombre est évalué en moyennant le nombre de coups dans la région du nuage atomique (schématisée par le trait pointillé en Fig.2.27(c)) en l'absence de ce dernier, *i.e.*, sur l'image du faisceau incident $I_i(x, z)$. Cette moyenne est ensuite divisée par la valeur du ratio $s = I_i/I_{sat}$ nous donnant le nombre de coups par pixel. Cette valeur est évaluée pour chaque impulsion d'intensité différente. Les résultats correspondants sont présentés en Fig.2.29 et sont comparés à la valeur théorique (2.43) avec les paramètres suivants : $\gamma = 2$, $T_{opt} = 0.21$, $\eta = 0.173$ et un gain $G = 15$ choisi de façon à ne pas saturer la caméra lors de l'acquisition des images. On constate une différence entre les valeurs mesurées et celles attendues (~ facteur 2) pouvant provenir d'une mauvaise focalisation de la caméra sur le nuage (modifiant alors le grandissement γ).

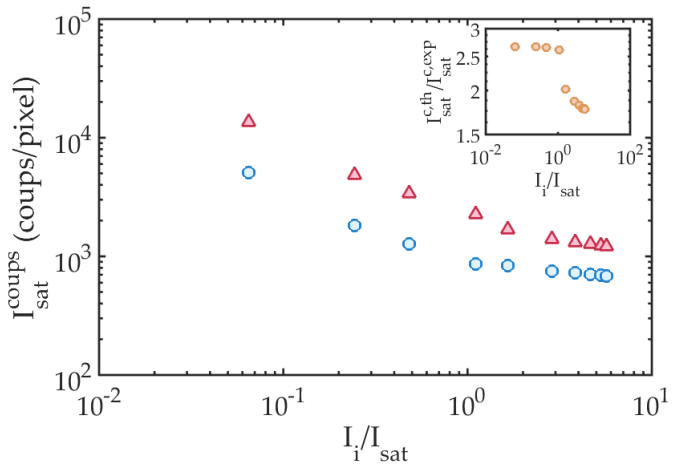


FIGURE 2.29 – **Comparaison des nombres de coups expérimental et théorique correspondant à l'intensité de saturation.** Le nombre de coups par pixel théorique (triangles rouges) calculé à partir de (2.43) est comparé au nombre de coups expérimental (cercles bleus) calculé *via* la méthode décrite dans le texte. Ce nombre correspond au nombre de photons reçus par pixel pour un faisceau d'intensité égale à I_{sat}. En *inset*, le ratio de ces deux nombres est tracé et vaut à peu près 2.

Analyse des résultats

Nous prenons donc une série d'images par absorption du nuage pour différentes intensités. Ensuite, nous analysons ces données en faisant varier le paramètre α^* de 0.5 à 1.5 dans l'expression de la profondeur optique (2.38), dont l'évolution est présentée en Fig.2.30. On représente également la déviation standard de chacune de ces courbes afin de déterminer le facteur de correction α^*. En effet, comme nous l'avons mentionné au tout début de cette section, la profondeur optique ne dépend que des propriétés du nuage atomique et non de l'intensité incidente, ce qui signifie que l'on cherche la valeur de α^* pour laquelle $od(\alpha^*)$ est constante.

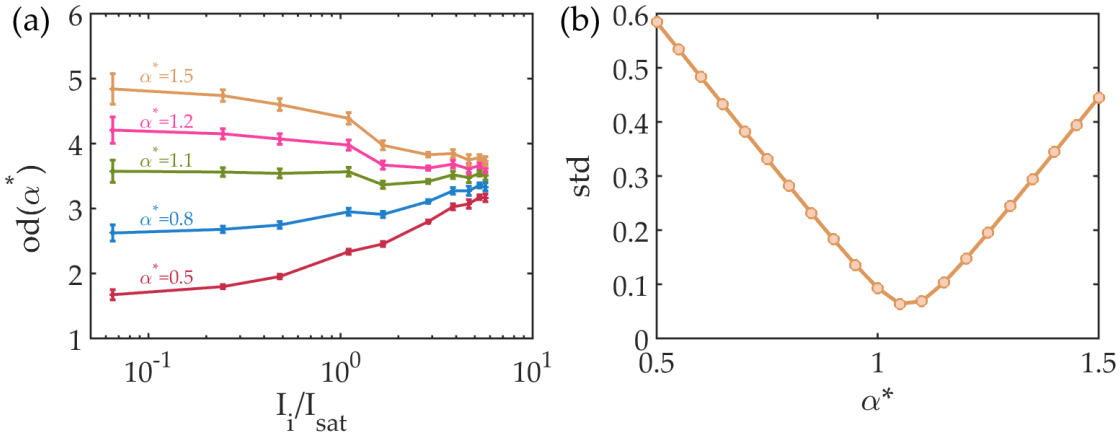


FIGURE 2.30 – **Évolution de la profondeur optique en fonction de l'intensité incidente pour différentes valeurs de α^*.** (a) La profondeur optique est tracée en fonction du ratio des intensités incidentes et de saturation pour différentes valeurs du facteur de correction α^*, calculée à partir de (2.38). (b) La déviation standard (std) des courbes (cercles oranges) est également présentée. La profondeur optique ne dépend pas de l'intensité (cf. texte) ainsi on cherche la valeur de α^* pour laquelle la std est minimale, soit $\alpha^* = 1.05 \pm 0.08$.

D'après nos mesures, cette valeur vaut $\alpha^* \simeq (1.05 \pm 0.08)$. Cette correction sur la valeur de l'intensité de saturation effective est donc minime, ce qui signifie que le nombre d'atomes estimé est correct. Nous pouvons maintenant affiner ce nombre en prenant en compte ce facteur de correction, *i.e.*, en prenant dorénavant $\sigma \equiv \sigma/\alpha^*$ dans l'expression (2.5).

Il faut préciser que cette calibration a été effectuée avec un faisceau laser différent en polarisation que celui utilisé pour imager les atomes dans la séquence de refroidissement décrite précédemment dans ce chapitre. Ainsi cette valeur de α^* n'est valide que dans le cas où les atomes sont imagés dans la configuration utilisée ici. Pour calibrer un nouvel axe d'imagerie, nous pouvons soit effectuer une calibration identique sur le nouvel axe, soit calibrer le nombre d'atomes d'un nuage par l'axe précédent et utiliser ce même nuage pour calibrer le nouvel axe.

2.5 Conclusions et perspectives

Ce chapitre nous aura permis de détailler la séquence expérimentale permettant de refroidir les atomes jusqu'au régime de dégénérescence quantique dans lequel ils forment une onde macroscopique cohérente. Nous partons d'un nuage avec un très grand nombre d'atomes sur lequel nous effectuons diverses étapes de refroidissement, optimisées de façon à réduire la température tout en limitant les pertes, inévitables et colossales afin d'avoir une thermalisation efficace ($\sim 99.92\%$). Nous avons obtenu un condensat de Bose-Einstein avec environ 1.6×10^6 atomes et une température inférieure à 200 nK dont la caractérisation qualitative a été présentée. Les mesures quantitatives précises n'ont pu être réalisées en raison des limites du système d'imagerie. Cependant nous avons détaillé plusieurs arguments qui semblent confirmer la transition dans ce régime de dégénérescence quantique : augmentation soudaine de la densité optique, estimation de la température en-dessous de la température critique et profil en double structure.

Finalement nous avons réalisé une mesure pour calibrer le nombre d'atomes de manière absolue. Celle-ci s'effectue par une mesure par absorption à forte saturation et permet de déterminer le facteur de correction sur la section efficace. Ce facteur tient compte des imperfections sur la polarisation du faisceau d'imagerie ou de l'orientation des champs magnétiques résiduels. Cette mesure a été réalisée sur un système d'imagerie différent de celui utilisé pour la caractérisation de la séquence décrite précédemment. Il est maintenant utilisé

pour imager les nuages plus petits (e.g., à partir des évaporations RF).

Par ailleurs, suite à l'obtention du BEC nous avons installé un nouveau système d'imagerie, positionné sous la chambre à vide, en vue de réaliser une imagerie sublongueur d'onde des atomes piégés dans un réseau optique à 1064 nm. Cette méthode d'imagerie (non détaillée ici) est basée sur les méthodes de super-résolution rencontrées en biologie : les états fondamental et excité sont modulés spatialement, les atomes piégés dans le réseau optique sont excités tous les n sites par un faisceau accordé sur la transition qui est ensuite modifié pour exciter d'autres sites. Ainsi on récupère une série d'images que l'on assemble afin de reformer l'image finale. Pour plus de détails, des calculs ont été réalisés dans les thèses précédentes : [Busquet, 2017; Vasquez Bullon, 2016]. Suite à l'installation de ce nouveau système d'imagerie nous avons eu des difficultés à obtenir de nouveau un BEC, ainsi nous avons procédé à quelques modifications de la séquence dont nous avons discuté précédemment (pompage optique, piège dipolaire croisé, ré-optimisation des évaporations, ...).

2.6 Summary

In this chapter, we detailed the experimental sequence that we used to reach the condensation regime. We first described the experimental apparatus which includes an optical bench for 780nm lasers. The latter are split into different beams to trap and cool down ^{87}Rb atoms (see Fig.2.2). We also discussed the absorption imaging system that is presented in Fig.2.3. We reported its magnification measurement (0.21) realized by time of flight (TOF) imaging (see equation (2.12) and Fig.2.4). In section 2.1.4 we mentioned some of the different issues we met when trying to reach very low temperatures (e.g., vacuum quality, magnetic trap oscillations).

Then we presented the optimizations for each step of the sequence, whose results are summarized in Fig.2.21. First, the realization of a 2D and 3D-MOT led us to a cloud with 2 billion of atoms at a temperature of 470 µK, along with a phase space density (PSD) of 5×10^{-8}. We also reported the measurements of loading time and lifetime of the 3D-MOT which are about 1.4 s and 12 s, respectively. The next step was a compressed-MOT (CMOT) where the magnetic gradient was raised to increase the atomic density. Here we gained one order of magnitude for the density for a temperature of 121 µK without atom losses. We showed the optimization of the detuning value during the molasses step. The latter allows us to go beyond the Doppler cooling limit to obtain an atomic cloud at 39 µK with a PSD of 10^{-5}. After this stage, the atoms are depumped from F = 2 to F = 1 and loaded into a magnetic trap, which causes the loss of two thirds of the atoms (3 hyperfine states). Moreover the temperature is higher (150 µK) and the PSD is lower ($3.5\ 10^{-7}$). Once the atoms were loaded, we proceeded to 3 evaporation ramps by generating a RF wave to truncate the magnetic trap (see 2.14). When collision rates are high, this process results in an efficient cooling while limiting atom losses. For instance, we reached a temperature of 34 µK along with a PSD of 2×10^{5}. The magnetic trap lifetime was estimated at 12 s (see Fig.2.15). To cool down the atoms, we implemented a hybrid trap that combines optical and magnetic trapping advantages while limiting the drawbacks. The idea is to load the large number of atoms obtained in the magnetic trap in a dipole trap formed by a 1064nm traveling laser beam. This step requires to accurately determine the zero of magnetic field. Consequently we proceeded to a RF spectroscopy by imaging the atomic cloud as a function of the RF frequency (see Fig.2.17). Next the optimization of optical evaporations led us to a very cold atomic cloud we tried to characterize.

In section 2.3 we qualitatively demonstrated the different signatures of a BEC that was observed in our experiment. The analysis is not totally quantitative since our initial imaging system was limiting the characterization at short time of flight resulting in poor-quality or unusable date. Nevertheless, with this system, we showed a sudden increase of the optical density when the power at the end of the last optical evaporation was reduced (see

Fig.2.23). Secondly we were able to distinguish a double-structure profile when imaging the condensate. As we plotted in Fig.2.24, it consists of a thermal part describing the edges of the cloud and a condensed part at the center of the cloud that was not spatially resolved by our imaging system. Thirdly we estimated the temperature of the atomic cloud by defining upper and lower experimental boundaries estimated from different hypotheses along with theoretical critical temperatures T_c (see Fig.2.25), in order to verify the atomic cloud temperature went down below T_c. Consequently we estimated that the BEC temperature was below 200 nK. Its lifetime was also estimated at 15 s, which is *a priori* sufficient for future objectives.

In the last part, we performed an absolute measurement of the number of atoms in the atomic cloud. This was done by imaging a dense atomic cloud with high intensities in order to extract the correction factor α^* for cross section. This factor takes into account possible polarization imperfections for imaging beam or residual magnetic field orientations. In our case it was evaluated around $\alpha^* \sim 1$ (see Fig.2.30), resulting in an unchanged calibration for the number of atoms.

Currently, a new imaging system with higher resolution was installed in order to image atoms in subwavelength optical lattices. The imaging technique (not detailed in this manuscript) is inspired from bio-imaging techniques. Moreover, some changes have been made in the experimental sequence following this modification (e.g., optical pumping, crossed optical dipole trap, new optimization for evaporation steps).

Références

Anderson, M. H., Ensher, J. R., Matthews, M. R., Wieman, C. E., and Cornell, E. A. (1995). Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. *Science*, 269. 44

Bertrand, J. (1878). *Recueil des travaux scientifiques de Léon Foucault*. 50

Bjorkholm, J. E. (1988). Collision-limited lifetimes of atom traps. *Physical Review A*, 38(3) :1599–1600. 49

Brzozowski, T. M., Mcz, M., Zawada, M., Zachorowski, J., and Gawlik, W. (2002). Time-of-flight measurement of the temperature of cold atoms for short trap–probe beam distances. *J. Opt. B : Quantum Semiclass. Opt*, 4(02) :62–66. 48

Burt, E. A., Ghrist, R. W., Myatt, C. J., Holland, M. J., Cornell, E. A., and Wieman, C. E. (1997). Coherence, Correlations, and Collisions : What One Learns about Bose-Einstein Condensates from Their Decay. *Physical Review Letters*, 79(3) :337–340. 72

Busquet, C. (2017). *Développement d'un système d'imagerie superrésolue d'un gaz d'atomes ultrafroids piégés dans des réseaux*. PhD thesis, Université de Bordeaux. 45, 49, 51, 60, 61, 81

Castin, Y., Wallis, H., and Dalibard, J. (1989). Limit of Doppler cooling. *Journal of the Optical Society of America B*, 6(11) :2046. 57

Cheinet, P. (2006). *Conception et Réalisation d'un Gravimètre à Atomes Froids*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI. 51

Corney, A. (1997). *Atomic and Laser Spectroscopy*. Oxford edition. 61

Dalibard, J. (2006). "Atomes ultrafroids", Notes de cours, ENS. 48

Dalibard, J. (2015). Leçons du Collège de France, Chaire Atomes et Rayonnement, "Une brève histoire des atomes froids". 51

Dalibard, J. and Cohen-Tannoudji, C. (1989). Laser cooling below the Doppler limit by polarization gradients : simple theoretical models. *Journal of the Optical Society of America B*, 6(11) :2023. 57

Davis, K. B., Mewes, M.-O., Joffe, M. A., Andrews, M. R., and Ketterle, W. (1995). Evaporative Cooling of Sodium Atoms. *Physical Review Letters*, 74(26) :5202–5205. 59

Dieckmann, K., Spreeuw, R. J. C., Weidemüller, M., and Walraven, J. T. M. (1998). Two-dimensional magneto-optical trap as a source of slow atoms. *Physical Review A*, 58(5) :3891–3895. 51

Durfee, D. S. and Ketterle, W. (1998). Experimental studies of Bose-Einstein condensation. *Optics Express*, 2(8) :299. 68

Foot, C. J. (2005). *Atomic physics*. Oxford University Press. 47

Grimm, R., Weidemüller, M., and Ovchinnikov, Y. B. (2000). Optical Dipole Traps for Neutral Atoms. *Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 42. 66

Hess, H. F. (1986). Evaporative cooling of magnetically trapped and compressed spin-polarized hydrogen. *Physical Review B*, 34(5) :3476–3479. 58

Ketterle, W. and Druten, N. V. (1996). Evaporative Cooling of Trapped Atoms. *Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 37 :181–236. 58

Ketterle, W., Durfee, D., and Stamper-Kurn, D. (1999). Making, probing and understanding Bose-Einstein condensates. In *Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi"*, Amsterdam. IOS Press. 58, 75

Lin, Y.-J., Perry, A. R., Compton, R. L., Spielman, I. B., and Porto, J. V. (2009). Rapid production of R 87 b Bose-Einstein condensates in a combined magnetic and optical potential. *Physical Review A*, 79(6) :063631. 59, 60

Lu, Z. T., Corwin, K. L., Renn, M. J., Anderson, M. H., Cornell, E. A., and Wieman, C. E. (1996). Low-Velocity Intense Source of Atoms from a Magneto-optical Trap. *Physical Review Letters*, 77(16) :3331–3334. 51

Metcalf, H. J. and van der Straten, P. (1999). *Laser Cooling and Trapping*. Graduate Texts in Contemporary Physics. Springer New York, New York, NY. 51

Metcalf, H. J. and van der Straten, P. (2003). Laser cooling and trapping of atoms. *Journal of the Optical Society of America B*, 20. 74

Monroe, C., Swann, W., Robinson, H., and Wieman, C. (1990). Very cold trapped atoms in a vapor cell. *Physical Review Letters*, 65(13) :1571–1574. 53

Petrich, W., Anderson, M. H., Ensher, J. R., and Cornell, E. A. (1994). Behavior of atoms in a compressed magneto-optical trap. *Journal of the Optical Society of America B*, 11(8) :1332. 56

Petrich, W., Anderson, M. H., Ensher, J. R., and Cornell, E. A. (1995). Stable, Tightly Confining Magnetic Trap for Evaporative Cooling of Neutral Atoms. *Physical Review Letters*, 74(17) :3352–3355. 59

Phillips, W. D. (1998). Nobel Lecture : Laser cooling and trapping of neutral atoms. *Reviews of Modern Physics*, 70(3) :721–741. 51

Phillips, W. D. and Metcalf, H. (1982). Laser Deceleration of an Atomic Beam. *Physical Review Letters*, 48(9) :596–599. 51

Pitaevskii, L. (1996). Dynamics of collapse of a confined Bose gas. *Physics Letters A*, 221(1-2) :14–18. 65

Raab, E. L., Prentiss, M., Cable, A., Chu, S., and Pritchard, D. E. (1987). Trapping of Neutral Sodium Atoms with Radiation Pressure. *Physical Review Letters*, 59(23) :2631–2634. 53

Reinaudi, G., Lahaye, T., Wang, Z., and Guéry-Odelin, D. (2007). Strong saturation absorption imaging of dense clouds of ultracold atoms. *Optics Letters*, 32(21) :3143. 75

Savard, T. A., O'Hara, K. M., and Thomas, J. E. (1997). Laser-noise-induced heating in far-off resonance optical traps. *Physical Review A*, 56(2) :R1095–R1098. 64

Schoser, J., Batär, A., Löw, R., Schweikhard, V., Grabowski, A., Ovchinnikov, Y. B., and Pfau, T. (2002). Intense source of cold Rb atoms from a pure two-dimensional magneto-optical trap. *Physical Review A*, 66(2) :023410. 51

Söding, J., Guéry-Odelin, D., Desbiolles, P., Chevy, F., Inamori, H., and Dalibard, J. (1999). Three-body decay of a rubidium Bose–Einstein condensate. *Applied Physics B*, 69(4) :257–261. 72

Steck, D. A. (2001). Rubidium 87 D Line Data. 44, 55

Sukumar, C. V. and Brink, D. M. (1997). Spin-flip transitions in a magnetic trap. *Physical Review A*, 56(3) :2451–2454. 59

Townsend, C. G., Edwards, N. H., Cooper, C. J., Zetie, K. P., Foot, C. J., Steane, A. M., Szriftgiser, P., Perrin, H., and Dalibard, J. (1995). Phase-space density in the magneto-optical trap. *Physical Review A*, 52(2) :1423–1440. 48

Ungar, P. J., Weiss, D. S., Riis, E., and Chu, S. (1989). Optical molasses and multilevel atoms : theory. *Journal of the Optical Society of America B*, 6(11) :2058. 57

Vasquez Bullon, H. S. (2016). *Construction d'une nouvelle expérience pour l'étude de gaz quantiques dégénérés des réseaux optiques, et étude d'un système d'imagerie super-résolution*. PhD thesis, Université de Bordeaux. 45, 46, 51, 81

Conclusion

Dans cette première partie, le Chapitre 1 nous aura permis d'expliquer le phénomène de condensation. Nous avons également défini les réseaux optiques avec lesquels il est possible de piéger des atomes et de simuler des transitions de phase quantiques. Cela nous aura permis de présenter le contexte dans lequel s'inscrit le projet AUFRONS. Ainsi nous avons défini l'approche adoptée dans ce projet qui consiste à piéger des atomes en champ proche d'une nanostructure. Cela permet de diminuer la période du réseau pour atteindre de nouvelles échelles d'énergie dans le réseau. Pour cela nous avons brièvement mentionné le principe de la méthode de piégeage que nous avons implémenté. La partie II est entièrement consacrée à l'étude détaillée de cette méthode de piégeage.

Le Chapitre 2 nous a permis d'appliquer les principes et techniques de refroidissement d'atomes en détaillant la séquence expérimentale mise en place. Celle-ci nous a mené au régime de dégénérescence quantique que nous avons caractérisé. Cette caractérisation du condensat était qualitative en raison des limites du système d'imagerie. Cependant les arguments que nous avons présentés semblent confirmer cette transition vers le régime de dégénérescence. L'obtention d'un condensat est cruciale pour le transfert des atomes dans le réseau sublongueur d'onde créé par la méthode de piégeage.

English version

In this first part, Chapter 1 allowed us to explain Bose-Einstein condensation. We introduced optical lattices in which atoms can be trapped to simulate quantum phase transitions. Thus we presented the context within which the AUFRONS project is evolving. We defined the alternative adopted in this project, which consists of trapping atoms in the near field of nanostructures. The goal is to reduce the lattice period in order to reach new energy scales within the lattice. Finally we briefly mentioned the principle of the trapping method we have implemented. Part II is entirely devoted to detail this trapping method.

In Chapter 2 we applied the atom cooling principles and techniques by going through the experimental sequence we set up. The latter led us to reach the quantum degeneracy regime which we characterized. Because of the poor-quality imaging system, this characterization was mainly qualitative. However the arguments we listed tend to confirm this transition towards the condensation regime. Having a condensate is primordial to load the atoms in the subwavelength potential generated with the trapping method.

Deuxième partie

Simulations du potentiel de piégeage d'atomes froids en champ proche de surfaces nanostructurées

Introduction

Les progrès réalisés en nanotechnologie permettent de concevoir des structures aux dimensions inférieures à la longueur d'onde atomique. Ainsi de nombreuses applications ont pour but d'interfacer des atomes et des nanostructures, où des effets collectifs importants peuvent être exploités. Le projet dans lequel s'inscrit cette thèse vise à piéger des atomes dans des potentiels sublongueur d'onde en champ proche d'une surface. Comme nous l'avons expliqué en fin de Chapitre 1, cela permet d'augmenter les énergies du système et ainsi réduire sa dynamique.

Dans cette partie nous présentons les simulations théoriques de la méthode de piégeage effectuées pendant cette thèse. Tout d'abord le Chapitre 3 est dédié à la partie optique de cette méthode. Nous traiterons les optimisations géométriques et physiques des nanostructures utilisées en respectant la faisabilité expérimentale, point clé de notre méthode. Nous discuterons également des calculs des déplacements énergétiques des états atomiques sous l'influence d'un laser. Le Chapitre 4 traite des fluctuations quantiques du vide. Après avoir présenté l'effet Casimir-Polder, nous calculerons les déplacements des états atomiques fondamental et excité du ^{87}Rb. Enfin le Chapitre 5 utilisera tous les résultats obtenus pour mettre en place la méthode de piégeage. Pour cela nous détaillerons son implémentation théorique ainsi que les caractéristiques physiques (profondeur, fréquence, temps de vie, ...) des pièges obtenus.

English version

The recent progress realized in nanotechnology allows one to design structures of size below atomic wavelength. Consequently, many applications aim to interface atoms and nanostructures, for which important collective effects may be exploited. The project, in which this thesis is part of, aims at trapping atoms in subwavelength potentials in the near field of a surface. As we explained at the end of Chapter 1, the idea is to increase the energy scale within the lattice and reduce its dynamics.

In this second part, we present theoritical simulations of the trapping method. First of all, Chapter 3 is dedicated to the optical part of the method. We will report geometrical and physical optimization of nanostructures while making sure of experimental feasibility - key point of the method. We will also discuss energy shifts of atomic states due to the dipole-electric interaction. Chapter 4 deals with quantum vacuum fluctuations. After introducing Casimir-Polder effect, we will calculate the energy shifts for ground and excited states of ^{87}Rb. Finally, in Chapter 5 we will use all these results to set up the trapping method. We will theoretically detail its implementation along with the resulting trap characteristics (depth, frequency, lifetime, ...).

Chapitre 3

Optimisation de la géométrie de la nanostructure et calculs des potentiels optiques

« Voir le possible là où les autres voient l'impossible, telle est la clé du succès. »

Charles-Albert Poissant

Sommaire

3.1 Méthode de piégeage : point clé 92
3.2 Résonance plasmonique 92
3.2.1 Plasmons de surface 93
3.2.2 Configuration de la surface 99
3.3 Interaction atome-champ : effet Stark dynamique 110
3.3.1 Hamiltoniens 110
3.3.2 Polarisabilité atomique 111
3.3.3 Déplacement énergétique : traitement semi-classique 112
3.4 Déplacements optiques : application à l'atome de ^{87}Rb 115
3.5 Summary 119

Dans ce chapitre nous présenterons la partie optique de notre méthode de piégeage, notamment en discutant de l'optimisation de la géométrie de la nanostructure de façon à maximiser la résonance plasmonique. Ainsi, dans un premier temps nous détaillerons la physique des plasmons-polaritons de surface en étudiant leurs caractéristiques et nous expliquerons leur rôle dans notre méthode de piégeage en champ proche.

Nous détaillerons ensuite les calculs des déplacements énergétiques des états de l'atome de ^{87}Rb sous l'influence d'une onde électromagnétique. Nous avons déjà brièvement discuté du déplacement énergétique des états d'un atome à deux niveaux dans le Chapitre 1, lorsque nous avons introduit les réseaux optiques dans la partie 1.2. Nous allons ici détailler ce calcul pour un atome à plusieurs niveaux et explorer les différents régimes d'interaction (champs faible, fort et intermédiaire), qui nous permettront de calculer les potentiels optiques selon les configurations d'intensités lasers.

3.1 Méthode de piégeage : point clé

Nous avons brièvement expliqué le principe de la technique de piégeage en fin de Chapitre 1. Un des points clés de la méthode est la capacité à moduler l'état excité $5P_{3/2}$ de l'atome de Rubidium de façon à obtenir un profil évanescent suffisamment fort pour créer la barrière de potentiel (nous reviendrons plus en détails sur ce point dans le Chapitre 5).

Nous devons ainsi trouver un phénomène physique capable de vérifier cette condition. Pour cela nous nous sommes orientés vers les plasmons de surface. En effet, comme nous le verrons dans la partie suivante, la résonance plasmonique permet un fort confinement des champs électriques au niveau de l'interface de la structure et génère, *via* des oscillations de charge, un profil d'intensité évanescent. Le premier avantage d'utiliser cette résonance réside dans l'utilisation d'un laser pour l'excitation des plasmons. Elle permet ainsi un contrôle optique, laissant à l'expérimentateur un certain nombre de degrés de liberté sur lesquels agir (fréquence et puissance du faisceau). Le deuxième avantage est l'intensité avec laquelle ce phénomène se produit. En effet, le confinement des champs dans des dimensions sublongueur d'onde permet l'augmentation de l'intensité de quelques ordres de grandeur par rapport à l'intensité incidente.

Pour réaliser cette excitation plasmonique nous prenons un laser désaccordé (δ_{1529} =25 pm) sur le bleu de la transition $5P_{3/2} - 4D_{3/2}$ (1529.366 nm), soit une longueur d'onde λ_{1529} = 1529.34 nm. Le schéma en Fig.3.1 récapitule les deux lasers et les deux transitions atomiques utilisés pour la méthode de piégeage (pour plus de détails sur la structure hyperfine : voir Fig.A.1 en Annexe A). Le second laser (en violet) est désaccordé sur la transition à 780.241 nm d'une quantité $\delta_{780}(z)$. La dépendance spatiale de ce désaccord permet de créer la barrière de potentiel en couplant les deux états 5S et 5P. Son rôle sera détaillé dans le dernier chapitre lorsque nous calculerons le potentiel de piégeage.

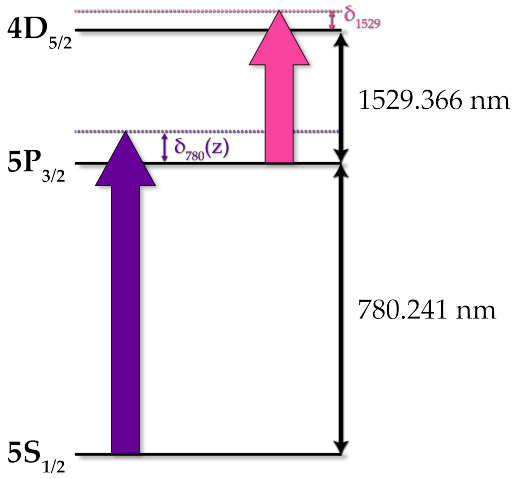


FIGURE 3.1 – **Schéma récapitulatif des transitions utilisées pour la méthode de piégeage.** Un premier laser désaccordé de la transition $5P_{3/2} - 4D_{3/2}$ du ^{87}Rb avec une longueur d'onde λ_{1529} = 1529.34 nm (rose) est utilisé pour exciter les plasmons de surfaces et moduler l'état 5P avec un profil d'intensité exponentiellement décroissant. Le second laser désaccordé sur la transition $5S_{1/2} - 5P_{3/2}$ (violet) permet de coupler les deux états et de créer une barrière de potentiel (cf. Chapitre 5).

3.2 Résonance plasmonique

Nous allons à présent discuter des caractéristiques des plasmons de surfaces avant de traiter de l'optimisation des structures (matériaux et géométries) avec lesquelles nous effectuerons les simulations dans le dernier chapitre.

3.2.1 Plasmons de surface

Origines historique et physique

On sait que le spectre d'un réseau de diffraction n'est pas distribué de manière régulière [Palmer and Loewen, 2005], ce qui signifie que toute la lumière incidente n'est pas recombinée pour former une lumière blanche. Le faisceau incident est diffracté dans les différents ordres du réseau selon la longueur d'onde et l'angle incident. En 1902 puis plus tard en 1935, Robert W. Wood reporta ses expériences et ses observations sur des réseaux de diffraction métalliques [Wood, 1902, 1935]. Il remarqua des anomalies dans la distribution du spectre de ces derniers et proposa un modèle basé sur des interférences constructives et destructives. Trois ans plus tard, en 1938, Ugo Fano développa alors l'approche des plasmons que l'on connaît actuellement (sans pour autant les nommer ainsi) [Fano, 1941] : des ondes évanescentes confinées à une interface diélectrique/métal sont excitées par certains ordres diffractés et absorbent énergétiquement une partie de la lumière incidente, qui ne peut alors être diffractée ou réfléchie. C'est à David Pines, en 1956, que l'on doit l'attribution du nom de plasmon [Pines, 1956] en raison de la ressemblance de ces oscillations collectives des électrons libres du métal avec les oscillations plasma observées dans les décharges gazeuses.

Les plasmons de surface (SPs, pour *Surface Plasmons*) sont donc des modes électromagnétiques créés par l'interaction de la lumière et des porteurs de charges à une interface (typiquement les électrons libres d'un métal). Dans ce cas on les appelle également Polaritons-Plasmons de Surface (SPPs pour *Surface Plasmon-Polaritons*) pour décrire le couplage des porteurs de charges (plasmons de surface) avec les ondes électromagnétiques dans le diélectrique ou le vide (polaritons). Dans la suite du manuscrit nous ferons le raccourci en les nommant plasmons de surface (SPs) pour simplifier la notation.

Description mathématique

Nous considérons une interface métal/diélectrique à $z = 0$, schématisée en Fig.3.2. Celle-ci est définie par deux milieux diélectrique et métallique semi-infinis décrits par leurs permittivités ε_d et $\varepsilon_m = \varepsilon'_m + i\varepsilon''_m$, respectivement.



FIGURE 3.2 – **Schéma de l'interface métal/diélectrique.** Un plasmon de surface peut se propager sur une interface décrite par un métal et un diélectrique de permittivités ε_m et ε_d, respectivement.

Nous pouvons écrire les équations de Maxwell à l'interface métal/diélectrique en l'absence de sources [Jackson, 1975] et déterminer les solutions correspondantes. Celles-ci se classent en deux catégories, selon la polarisation considérée : les modes polarisés s (ou TE pour *Transverse Electric*) et les modes polarisés p (ou TM pour *Transverse Magnetic*). Les modes polarisés s (resp. p) correspondent au champ électrique E (resp. magnétique H) parallèle au plan d'incidence. Si l'on fait le calcul on s'aperçoit qu'il n'existe pas de solutions pour des modes se propageant en polarisation s [1]. En revanche il existe une solution pour

1. Ceci est vrai pour les matériaux naturels. En revanche, il est possible d'avoir des SPs magnétiques avec des métamatériaux [Pendry et al., 1999].

les modes polarisés p si la condition suivante est respectée [Raether, 1988] :

$$\varepsilon_d k_{m,z} + \varepsilon_m k_{d,z} = 0, \tag{3.1}$$

où $k_{j,z}$ est la composante du vecteur d'onde $\mathbf{k}_j$ selon (Oz) dans le milieu j ($j \equiv d, m$). La norme du vecteur d'onde incident vaut $k_j = \sqrt{\varepsilon_j} k_0 = \sqrt{\varepsilon_j} 2\pi/\lambda_0$, où λ_0 est la longueur d'onde. Nous pouvons également écrire ce vecteur d'onde en fonction de ses différentes composantes, soit

$$\varepsilon_j k_0^2 = k_x^2 + k_{j,z}^2, \tag{3.2}$$

où k_x est la composante du vecteur d'onde dans la direction (Ox).

A partir des expressions (3.1) et (3.2), nous définissons le vecteur d'onde de propagation du plasmon $k_{sp} = k_x$ de la manière suivante :

$$k_{sp} = k'_{sp} + k''_{sp} = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_d \varepsilon_m}{\varepsilon_d + \varepsilon_m}}. \tag{3.3}$$

La permittivité du métal étant complexe, nous écrivons les parties réelle et imaginaire telles que

$$k'_{sp} = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_d \varepsilon'_m}{\varepsilon_d + \varepsilon'_m}}, \tag{3.4}$$

$$k''_{sp} = k_0 \left(\frac{\varepsilon_d \varepsilon'_m}{\varepsilon_d + \varepsilon'_m} \right)^{3/2} \frac{\varepsilon''_m}{2{\varepsilon'_m}^2}. \tag{3.5}$$

Nous pouvons ainsi définir k'_{sp} comme le produit du vecteur d'onde en espace libre et d'un indice effectif

$$n_{eff} = \sqrt{\frac{\varepsilon_d \varepsilon'_m}{\varepsilon_d + \varepsilon'_m}}. \tag{3.6}$$

La partie imaginaire k''_{sp} définit quant à elle l'absorption du SP lors de sa propagation selon (Ox).

Prenons l'exemple d'une interface métal/vide ($\varepsilon_d = 1$) avec la permittivité du métal décrite par le modèle de Drude [Ashcroft and Mermin, 1976] :

$$\varepsilon_m(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\Gamma\omega}, \tag{3.7}$$

avec la fréquence plasma ω_p et le taux de diffusion Γ. En insérant cette relation dans l'expression (3.3) nous calculons la relation de dispersion des SPs qui est représentée en Fig.3.3, pour de l'or. Pour cela nous avons utilisé les paramètres de Drude suivants : $\hbar\omega_p = 8.95$ eV et $\hbar\Gamma = 0.069$ eV [Johnson and Christy, 1972]. A basses fréquences les modes plasmons approchent la ligne de lumière (en bleu) définie par $\omega = kc$, *i.e.*, les modes en espace libre. A gauche de cette ligne correspondent les modes propagatifs ($k \geq \omega/c$) et à droite les modes évanescents ($k < \omega/c$), où les SPs se situent (courbe rouge). Lorsque la fréquence augmente les modes plasmons s'écartent de cette ligne pour tendre vers la valeur asymptotique $\omega = \omega_p/\sqrt{2}$.

Longueurs caractéristiques

■ Longueur d'onde

Une première longueur caractéristique que nous pouvons facilement déduire des calculs précédents est la longueur d'onde du plasmon de surface λ_{sp}, schématisée en Fig.3.4(a). D'après l'expression du vecteur d'onde (3.5) nous avons

$$\lambda_{sp} = \lambda_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_d + \varepsilon'_m}{\varepsilon_d \varepsilon'_m}}. \tag{3.8}$$

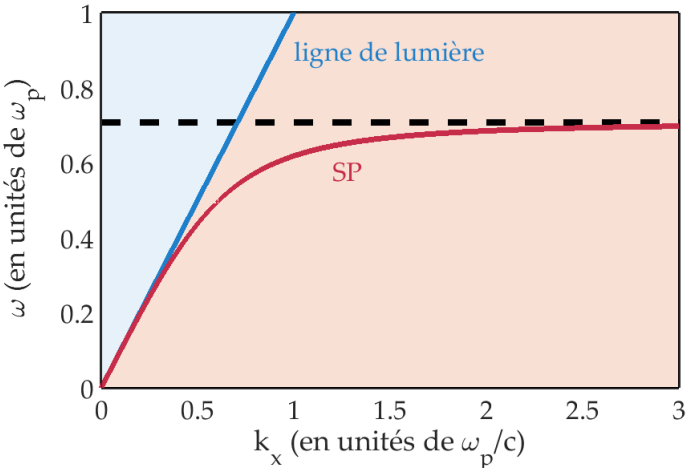


FIGURE 3.3 – **Relation de dispersion d'un SP.** Évolution de la fréquence angulaire ω (en unités de ω_p) en fonction de la composante du vecteur d'onde contenue dans le plan d'incidence k_x (en unités de ω_p/c) pour un plasmon de surface (courbe rouge) à une interface or/vide. La courbe bleue correspond à la ligne de lumière définie par $\omega = kc$ (modes de propagation dans le vide). A gauche de cette courbe se trouvent les modes propagatifs (zone bleue) et à droite les modes évanescents (zone rose). A basses fréquence le mode SP suit la ligne de lumière puis s'écarte pour tendre vers la valeur asymptotique $\omega = \omega_p/\sqrt{2}$ (trait pointillé noir) à haute fréquence.

La dimension caractéristique est ainsi de l'ordre de λ_0 (~ µm).

■ **Propagation**

La longueur de propagation δ_{sp} est définie comme la distance au bout de laquelle l'intensité du mode est diminuée d'un facteur 1/e. Elle est donnée par $\delta_{sp} = 1/2k''_{sp}$ [Barnes, 2006], soit d'après (3.5),

$$\delta_{sp} = \frac{1}{k_0}\left(\frac{\varepsilon_d + \varepsilon'_m}{\varepsilon_d \varepsilon'_m}\right)^{3/2} \frac{{\varepsilon'_m}^2}{\varepsilon''_m}. \tag{3.9}$$

Physiquement elle se traduit comme la distance sur laquelle le SP se propage selon (Ox) avant d'être absorbé (thermiquement) par le métal (cf. Fig.3.4(a)). Pour un métal à faible pertes, et dans le cas où $|\varepsilon'_m| >> |\varepsilon_d|$, la longueur de propagation peut s'approcher par

$$\delta_{sp} \approx \frac{1}{k_0}\frac{{\varepsilon'_m}^2}{\varepsilon''_m}. \tag{3.10}$$

Nous constatons alors que la longueur de propagation du SP est d'autant plus grande que le métal est à faible pertes (grande partie réelle $|\varepsilon'_m|$ et faible partie imaginaire ε''_m).

■ **Épaisseur de peau**

Le champ électrique décroit exponentiellement selon (Oz) et peut s'écrire

$$E_z = e^{-|k_{j,z}||z|}. \tag{3.11}$$

De cette façon on peut définir l'épaisseur de peau δ_j, de la même manière que pour la longueur d'absorption mais dans la direction perpendiculaire à la propagation, correspondant ainsi à la distance sur laquelle le plasmon s'étend selon (Oz) dans le matériau j (cf. Fig.3.4(a)). D'après (3.11), en utilisant les expressions (3.2) et (3.3), on peut en déduire les

épaisseurs de peau dans le diélectrique et dans le métal suivantes :

$$\delta_d = \frac{1}{k_0}\left|\frac{\varepsilon_d + \varepsilon'_m}{\varepsilon_d^2}\right|^{1/2}, \tag{3.12}$$

$$\delta_m = \frac{1}{k_0}\left|\frac{\varepsilon_d + \varepsilon'_m}{\varepsilon'^2_m}\right|^{1/2}. \tag{3.13}$$

Typiquement, on a δ_m ~ 10-100 nm et δ_m ~ 0.1-1µm.

Les ordres de grandeur de ces quatre longueurs caractéristiques sont résumés en Fig.3.4(b).

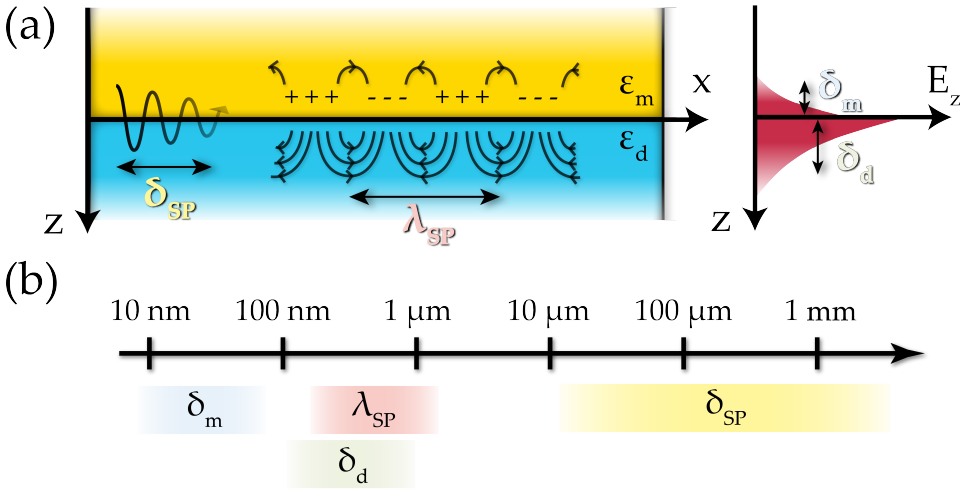


FIGURE 3.4 – **Longueurs caractéristiques des plasmons de surface.** (a) δ_{sp} correspond à la distance sur laquelle le SP se propage à l'interface, λ_{sp} est la longueur d'onde des oscillations collectives d'électrons libres (les lignes noires schématisant le champ électrique), δ_d et δ_m sont les distances caractéristiques sur lesquelles les plasmons décroissent dans la direction perpendiculaire à l'interface du côté diélectrique et métal, respectivement. (b) Ordres de grandeur de ces distances.

Résonance plasmonique

Pour qu'il y ait un transfert d'énergie d'une onde de lumière incidente aux SPs, il convient de garantir un accord de fréquence entre ces deux. Pour cela il faut que les composantes des vecteurs d'onde respectifs soient égales, soit

$$k_x^i = k'_{sp}, \tag{3.14}$$

où $k_x^i = k_0 n_d \sin\theta_i$, avec n_d l'indice du diélectrique et θ_i l'angle du faisceau incident. D'après (3.4) et (3.6), nous avons $k'_{sp} = n_{eff} k_0$, or $n_{eff} \geq n_d$, ce qui signifie que la condition (3.14) n'est pas respectée. Pour que cela soit le cas, il faut réécrire la condition de résonance plasmonique telle que

$$k'_{sp} = k_0 n_d \sin\theta_i \pm \mathrm{K}, \tag{3.15}$$

où K est un vecteur d'onde permettant de satisfaire la condition.

Il existe différentes manières de vérifier cette condition, *i.e.*, apporter ce vecteur d'onde supplémentaire K. Nous mentionnons ici deux techniques optiques, utilisées dans notre méthode pour la génération des SPs.

■ **Prisme : configuration Kretschmann-Raether**

Dans cette configuration dite de Kretschmann-Raether [Kretschmann and Raether, 1968], nous considérons une fine couche de métal d'épaisseur t_m entre deux diélectriques de permittivités ε_d et ε_i, dont le schéma est présenté en Fig.3.5.

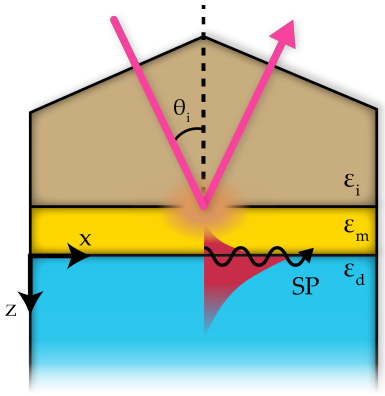


FIGURE 3.5 – **Résonance plasmonique avec une configuration en prisme de Kretschmann-Raether.** Dans cette configuration on considère un prisme, une couche de métal et un milieu diélectrique semi-infini de permittivités respectives ε_i, ε_m et ε_d. Un laser (en rose) incident à un angle θ_i permet de créer un champ évanescent (en orange) à l'interface prisme/métal par réflexion totale interne. Ce champ peut alors exciter les SPs à l'interface métal/diélectrique qui vont se propager selon (Ox) et générer un champ électrique évanescent (en rouge) selon (Oz).

Une onde incidente avec un angle θ_i permet de créer une onde évanescente au niveau de l'interface prisme/métal par réflexion totale interne si $n_i > n_d$. La composante du vecteur d'onde incident selon (Ox) est alors donnée par $k_x^i = k_0 n_i \sin\theta_i$. Cette onde évanescente va permettre de se coupler aux SPs de l'interface métal/diélectrique. La condition de résonance (3.15) s'écrit alors

$$k_x^i = k_{sp}, \tag{3.16}$$

où $k_{sp} \equiv k_{sp}^0 + \Delta K$, avec k_{sp}^0 défini par (3.3). La modification ΔK du vecteur d'onde plasmon par rapport à l'expression (3.3) provient de la prise en compte ici de l'épaisseur finie de métal t_m (*versus* semi-infinie pour (3.3)) et de la présence du prisme diélectrique de permittivité ε_i. Dans le cas où $e^{i2k_x^i t_m} << 1$, on peut montrer que [Raether, 1988]

$$\Delta K = \frac{\omega}{c}\frac{2}{1+|\varepsilon_i'|}\left(\frac{|\varepsilon_i'|}{|\varepsilon_i'|-1}\right)^{3/2} e^{-2|k_{sp}^0|t_m} r_{im} k_{sp}^0, \tag{3.17}$$

avec r_{im} le coefficient de réflexion en amplitude de l'interface prisme/métal.

Nous prenons l'exemple d'une couche d'or entre un prisme en verre et du vide ($\varepsilon_d = 1$). Nous traçons en Fig.3.6 la réflectivité d'une onde électromagnétique de longueur d'onde 780 nm en fonction de l'angle d'incidence θ_i, pour différentes épaisseurs de métal. Ces simulations sont réalisées avec le logiciel Reticolo [Hugonin and Lalanne, 2005]. Ce code est écrit en Matlab® et permet de calculer les amplitudes de diffraction d'une structure multicouches et/ou de réseaux à une ou deux dimensions en utilisant la méthode modale de Fourier (FMM pour *Fourier Modal Method* en anglais, ou également connu sous le nom RCWA pour *Rigorous Coupled-Wave Analysis*), que nous détaillerons dans le chapitre suivant. Concernant les résultats nous constatons que la réflectivité chute à 0 pour une épaisseur de métal $t_m = 45$ nm et un angle $\theta_i \simeq 44.6°$. Cela signifie que toute l'énergie de l'onde incidente a été transférée au plasmon. Théoriquement l'angle pour lequel on a une excitation plasmonique correspond à l'angle permettant d'avoir une réflexion totale interne, soit

$$\theta_{sp} \equiv \theta_{\text{TIR}} = \arcsin(n_{eff}/n_i). \tag{3.18}$$

A la longueur d'onde considérée ici on a $n_i \simeq 1.45$ et $n_{eff} \simeq 1.02$ [2] (cf. (3.6)), soit $\theta_{sp} \simeq 44.5°$, en adéquation avec notre observation.

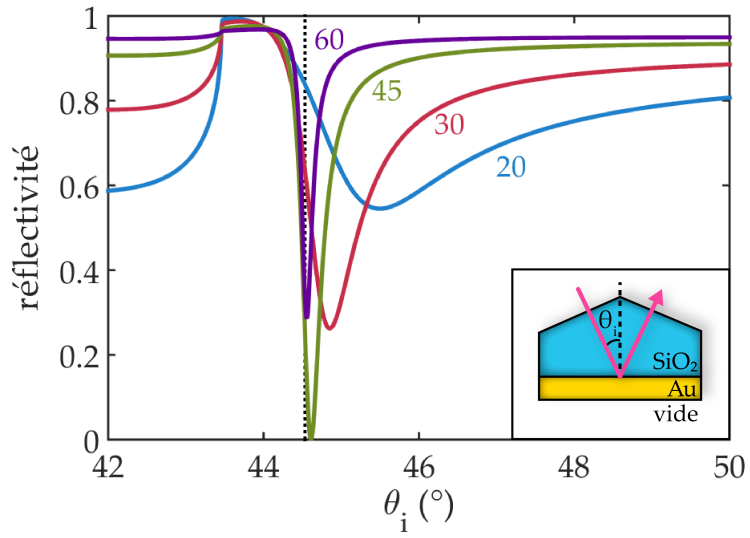


FIGURE 3.6 – **Réflectivité en configuration Kretschmann-Raether en fonction de l'angle incident et l'épaisseur du métal.** Évolution de la réflectivité d'une onde à 780 nm sur une couche en or entre un prisme en verre et du vide (voir *inset*) en fonction de l'angle incident θ_i pour différentes épaisseurs de métal : t_m = 20 nm (bleu), 30 nm (rouge), 45 nm (vert) et 60 nm (violet). L'angle pour lequel la résonance plasmonique est vérifiée vaut $\theta_{SP} \simeq 44.5$ (trait pointillé noir). Simulations réalisées avec Reticolo [Hugonin and Lalanne, 2005].

Il est également possible d'utiliser une autre configuration, dite de Otto, que nous ne détaillerons pas ici mais qui repose sur le même principe, où une couche de diélectrique est entre le prisme et le métal [Otto, 1968]. On peut noter qu'elle fut la première technique proposée pour exciter des SPs non-radiatifs.

■ Réseau de diffraction

On peut également satisfaire la condition de résonance avec un réseau de diffraction. En effet la période ℓ de la structure engendre un vecteur réseau $\Lambda = 2\pi/\ell$, permettant de se coupler avec le SP *via* les différents ordres du réseau n. La condition de résonance (3.15) s'écrit alors

$$k_x^i \pm n\Lambda = k_{sp}. \tag{3.19}$$

Ici aussi l'épaisseur du réseau est un paramètre sur lequel nous pouvons jouer pour minimiser la réflectivité, *i.e.*, maximiser le couplage avec les plasmons [Raether, 1988].

Applications

Il existe un grand nombre d'applications mettant en jeu les plasmons de surface. On les rencontre ainsi beaucoup en nanophotonique [Barnes et al., 2003] notamment pour leur rôle dans la transmission optique extraordinaire [Ebbesen et al., 1998] ou celui qu'ils pourraient jouer dans la miniaturisation des circuits photoniques grâce à leur capacité à concentrer et propager la lumière [Ditlbacher et al., 2002]. Il peuvent être aussi utilisés pour la microscopie en champ proche [Specht et al., 1992] ou plus concrètement comme détecteur biologique (ou *biosensor* en anglais) [Homola, 2003]. Nous avons mentionné ici quelques applications, mais il en existe de nombreuses autres. Pour en savoir plus le lecteur pourra se référer à des ouvrages tels que [Kik and Brongersma, 2007; Sarid and Challener, 2010].

2. Toutes les valeurs des indices de réfraction des matériaux sont tirés de [Palik, 1998].

3.2.2 Configuration de la surface

Un des objectifs majeurs de la nanostructure est sa capacité à générer ces SPs. Nous avons ainsi basé l'optimisation des matériaux et de la géométrie sur ce critère. Dans un premier temps nous nous sommes intéressés à une structure plane afin de valider la première étape de notre méthode (*i.e.*, créer une barrière de potentiel), puis nous avons étudié le cas d'un réseau 1D. Ce sont ces optimisations que nous allons maintenant passer en revue.

Prérequis

Avant de commencer les optimisations il est important de fixer les exigences sur le type de profil que nous souhaitons obtenir. En effet, comme nous l'avons mentionné lorsque nous avons brièvement discuté la méthode de piégeage en fin de Chapitre 1, un des critères principaux de cette méthode est la faisabilité expérimentale. Ainsi nous mentionnons ici quelques points cruciaux à respecter pour atteindre cet objectif.

■ Influence du métal sur les atomes

Nous venons de voir l'importance de la couche de métal afin d'obtenir une résonance plasmonique pour notre méthode de piégeage. De plus, des simulations ont été réalisées au sein de l'équipe sur la première étape du transport des atomes proches de la surface en tirant profit des franges d'interférence créées après réflexion d'un faisceau laser sur une structure métallique [Busquet, 2017]. Le faisceau arrive dans un premier temps avec un certain angle d'incidence et le nuage atomique est piégé dans une frange à une certaine distance de la structure. Ensuite, la rotation de la surface jusqu'à un angle d'incidence nul permet de réduire la distance inter-frange et par conséquent de transporter les atomes à quelques centaines de nm. La couche métallique est donc indispensable dans la conception de la structure pour piéger les atomes.

Cependant la présence du métal peut dépolariser le nuage atomique. En effet, les courants électriques induits thermiquement (bruit de Johnson-Nyquist) engendrent des champs électriques et magnétiques fluctuants à proximité de la structure [Johnson, 1928; Nyquist, 1928]. Ces fluctuations sont dues à la présence des électrons libres dans le métal, *i.e.*, sa conductivité σ. Ainsi un atome, confiné dans un champ magnétique en champ proche de la nanostructure, peut être piégé au minimum de champ mais cela ne correspond pas à l'état fondamental du potentiel magnétique (état où le champ serait maximal). Ce bruit thermique peut alors induire une décohérence sur l'atome en provoquant un retournement de spin, et par conséquent la perte de l'atome.

Nous considérons des atomes de ^{87}Rb initialement piégés dans l'état hyperfin $|i\rangle = |\mathrm{F} = 2\ m_\mathrm{F} = 2\rangle$, comme pour l'expérience présentée dans la référence [Jones et al., 2003]. Les fluctuations de champ magnétique peuvent induire une transition vers un sous-niveau Zeeman inférieur, comme par exemple $|f\rangle = |\mathrm{F} = 2\ m_\mathrm{F} = 1\rangle$. Le nombre d'atomes mesuré décroit alors avec un taux Γ^B_{sf}, les lettres 'sf' signifiant que l'on traite du retournement de spin (*spin-flip* en anglais). En calculant ce taux nous déduisons le temps τ_{sf} au bout duquel les atomes sont perdus par retournement du spin. Nous notons t_m l'épaisseur de la couche métallique, z_a la position de l'atome (≡ distance atome-surface) et δ la profondeur de peau qui correspond à la distance caractéristique au bout de laquelle le champ électromagnétique est atténué au sein d'un matériau conducteur. Cette grandeur est définie par [Jackson, 1975] : $\delta = \sqrt{2/\omega\mu_0\sigma(\mathrm{T})}$, où ω est la fréquence entre les deux états hyperfins considérés et $\sigma(\mathrm{T})$ la conductivité du métal à la température T. Typiquement l'écart ω est de l'ordre de plusieurs centaines de kHz.

D'après [Scheel et al., 2005], le temps de vie des atomes dans le piège est donné par

$$\tau_{sf} = \frac{64}{9}\frac{\tau_{sf}^{(0)}}{1+\bar{n}_{th}}\left(\frac{\omega}{c}\right)^3 \begin{cases} \dfrac{\delta^2 z_a}{2} & \text{si } \delta, t_m >> z_a \quad \text{(couche épaisse de métal)} \quad (3.20a) \\ \dfrac{\delta^2 z_a^2}{2t_m} & \text{si } \delta >> z_a >> t_m \quad \text{(couche fine de métal)} \quad (3.20b) \end{cases}$$

où l'on définit le temps de vie en espace libre à température nulle par

$$\tau_{sf}^{(0)} = \frac{3\pi\hbar c^3}{\mu_0 \omega^3}\left(g_s \mu_B\right)^2 S_{if}^2, \quad (3.21)$$

avec le facteur de Landé $g_s = 2$ et le facteur angulaire $S_{if}^2 = |\langle i|\hat{S}_x|f\rangle|^2 + |\langle i|\hat{S}_y|f\rangle|^2 = 2|\langle i|\hat{S}_x|f\rangle|^2$, $\hat{S}$ étant l'opérateur spin. Les fluctuations thermiques des modes électromagnétiques sont inclus dans l'expression de τ_{sp} à travers le facteur $(1+\bar{n}_{th})$. Le nombre d'occupation moyen des photons thermiques dans un mode à la fréquence ω donné par $\bar{n}_{th} = \left(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1\right)^{-1}$. Dans le cas de la transition $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$, on a $S_{if}^2 = 1/8$ [Rekdal et al., 2004] soit, en prenant $\omega = 500$ kHz et une température ambiante T=300 K : $\tau_{sf}^{(0)}/(1+\bar{n}_{th}) \sim 1.3 \times 10^{18}$ s (un ordre de grandeur au-dessus de l'âge de l'univers).

Nous traçons en Fig.3.7 l'évolution du temps de vie des atomes en fonction de la distance z_a dans les deux configurations (3.20a) (≡ milieu métallique semi-infini) et (3.20b) (fine couche de métal). Nous prenons de l'or pour lequel on trouve $\delta \simeq 107$ µm (on a $\sigma = 4.4 \times 10^7 (\Omega.m)^{-1}$ [Weber, 2003]). Dans le cas d'une fine couche de métal (trait pointillé bleu), nous prenons une épaisseur $t = 40$ nm. Nous constatons que dans les deux configurations, pour une distance atome-surface supérieure à 100 nm le temps de vie est supérieur à la dizaine de ms. Ce temps n'est pas limitant pour notre configuration de piégeage comme nous le verrons lorsque nous étudierons les différents effets limitant le temps de vie total du piège au Chapitre 5.

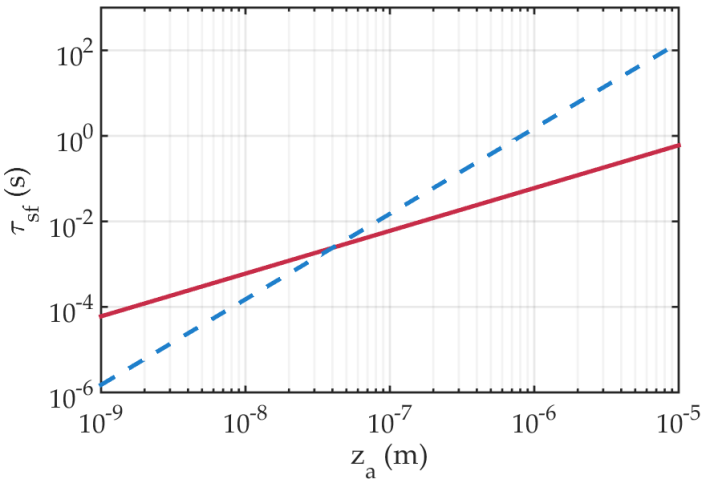


FIGURE 3.7 – **Temps de vie des atomes en champ proche d'une surface métallique.** Un atome piégé dans un champ magnétique en champ proche d'une surface métallique peut être perdu par retournement de spin en raison des fluctuations thermiques des électrons libres. Le temps de vie τ_{sf} pour un atome de ^{87}Rb dans l'état $|F = 2\ m_F = 2\rangle$ du niveau $5S_{1/2}$ est calculé en fonction de la distance atome-surface z_a dans le cas d'une surface en or semi-infinie (trait plein rouge) et d'une fine couche de métal de 40 nm d'épaisseur (trait pointillé bleu).

Pour réduire l'influence des retournements de spin, il est possible d'éloigner la surface métallique ou de refroidir la structure afin de réduire l'agitation thermique des porteurs de charges au sein du métal.

Par ailleurs, lorsqu'un atome est proche d'une nanostructure, son taux d'émission spontanée Γ_0 se trouve être modifié d'une quantité $\delta\Gamma$ telle que [Buhmann and Welsch, 2007]

$$\Gamma(z_a) = \Gamma_0 + \delta\Gamma(z_a) = \Gamma_0 \left[1 + \frac{2\pi c}{\omega_0} \mathrm{Tr\ Im\ G}^{(1)}(z_a, z_a, \omega_0)\right], \tag{3.22}$$

où ω_0 est la fréquence de transition et où la trace porte sur la partie imaginaire du tenseur de Green de diffusion $\mathrm{G}^{(1)}(z_a, z_a, \omega_0)$ qui décrit la propagation du champ qui fait un aller-retour entre l'atome positionné en z_a et l'interface structure/vide en $z = 0$. Pour un atome proche de la surface, nous pouvons approximer le tenseur de Green et obtenir [Buhmann et al., 2004]

$$\delta\Gamma(z_a) = \frac{\Gamma_0}{4(k_0 z_a)^3} \mathrm{Im}\left(\frac{\varepsilon(\omega_0) - 1}{\varepsilon(\omega_0) + 1}\right), \tag{3.23}$$

où nous notons ε la permittivité du matériau et $k_0 = \omega_0/c$ le vecteur d'onde incident. Nous traçons ce décalage en Fig.3.8 pour un milieu semi-infini en or. A partir de 100 nm nous avons $\delta\Gamma < 10^{-2}\Gamma_0$, ainsi les effets de la structure sur le taux d'émission spontanée Γ de l'atome sont négligeables à partir de cette distance. Par conséquent nous insérons une couche de diélectrique entre le métal et les atomes pour éloigner ces derniers de la couche métallique. En outre, la permittivité du diélectrique possède une partie imaginaire très faible, les effets d'absorption sont alors limités et le taux Γ_0 n'est alors que très peu voire nullement modifié (cf. relation (3.23)).

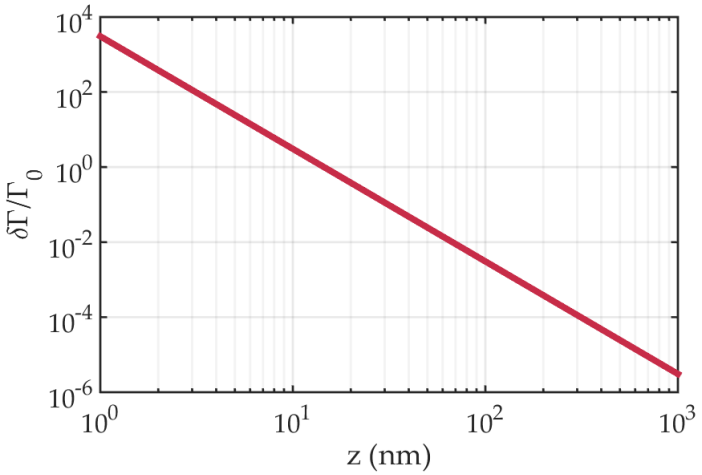


FIGURE 3.8 – **Modification du taux de diffusion en champ proche d'une nanostructure métallique.** En présence d'une structure semi-infinie en or, le taux d'émission spontanée dans le vide Γ_0 d'un atome de ^{87}Rb est modifié d'une quantité $\delta\Gamma$ en fonction de la distance atome-surface z_a.

■ Fabrication

Un autre point important concerne les techniques de fabrication disponibles pour la réalisation de la nanostructure. En effet, la conception expérimentale de surfaces aux dimensions nanométriques peut s'avérer délicate. Dans les simulations actuellement réalisées, nous avons considéré une surface multi-couches plane et une surface multi-couches structurée à une dimension, dont nous verrons les optimisations ci-après.

Ainsi nous présentons en Fig.3.9 un exemple de procédé expérimental qui pourrait être utilisé pour une nanostructure à 1D, comme celle que nous traiterons par la suite. Le principe est le suivant :

• une fine couche de métal (nécessaire pour la résonance plasmonique et le transport des atomes) est déposée sur un substrat (typiquement du Silicium) par réaction chimique (cf. Fig.3.9(a)). Les épaisseurs de ces couches peuvent descendre jusqu'à la dizaine de nm.

• le motif (e.g., des fentes unidimensionnelles ou des trous circulaires) est ensuite créé par Lithographie à Faisceau d'Ions (FIBL pour *Focused Ion Beam Lithography* en anglais), schématisé en Fig.3.9(b). Avec cette méthode on peut atteindre des diamètres de l'ordre de 10 nm [Volkert and Minor, 2007].

• des arêtes (ou piliers à 2D) sont ensuite extrudées par gravure chimique (MACE pour *Metal-Assisted Chemical Etching* en anglais) [Boarino et al., 2011; D'Ortenzi et al., 2016; Han et al., 2014], dont le résultat est schématisé en Fig.3.9(c). Les arêtes ne doivent pas être trop hautes (< 1 µm) afin d'assurer leur stabilité transverse.

• enfin, selon le type de matériau que l'on souhaite pour les arêtes, d'autres étapes peuvent être appliquées telle qu'une oxydation pour obtenir du Dioxyde de Silicium (SiO_2) schématisée en Fig.3.9(d).

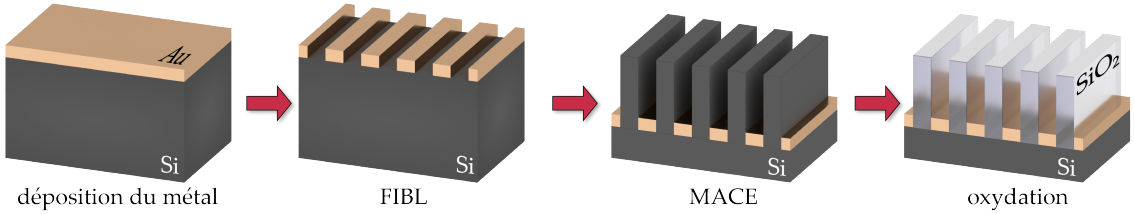


FIGURE 3.9 – **Exemple de procédé expérimental pour la fabrication d'une surface stratifiée et structurée.** (a) Une fine couche de métal (typiquement quelques dizaines de nm) est déposée sur un substrat, ici du Silicium (Si). (b) Le motif à deux dimensions (réseau de fentes) est créé par Lithographie à Faisceau d'Ions (FIBL). (c) Des arêtes en Si sont formées par gravure chimique (MACE). (d) Une étape d'oxydation permet d'obtenir des arêtes en verre (SiO_2).

■ Intensités des lasers

Comme nous l'avons décrit dans la méthode, des lasers sont utilisés pour piéger les atomes en champ proche de la surface. Ces faisceaux sont focalisés sur la surface et peuvent endommager cette dernière si les intensités sont trop élevées. Par conséquent il est nécessaire d'estimer les intensités maximales au-delà desquelles nous risquons de dégrader la structure par dissipation thermique.

Nous réalisons une première estimation en considérant un faisceau gaussien collimaté de rayon w_0, avec une distribution d'intensité radiale donnée par

$$\mathrm{I}(r) = \mathrm{I}_0 \mathrm{e}^{-2\frac{r^2}{w_0^2}}, \tag{3.24}$$

où $\mathrm{I}_0 = 2\mathrm{P}_0/\pi w_0^2$ est l'intensité au centre du faisceau de puissance P_0. Ainsi, on peut montrer que la température atteinte en régime stationnaire sur la surface, au centre du faisceau, augmente d'une quantité [Ready, 1971]

$$\Delta\mathrm{T} \simeq \frac{\mathrm{A}\mathrm{I}_0 w_0}{\mathrm{K}}\sqrt{\frac{\pi}{8}} = \frac{\mathrm{A}\mathrm{P}_0}{\sqrt{2\pi}w_0\mathrm{K}}, \tag{3.25}$$

où A est l'absorbance de l'or par le laser et K est la conductivité thermique du matériau. Afin d'éviter tout dommage sur la surface il faudra s'assurer de ne pas fixer une puissance P_0 trop élevée et/ou un rayon w_0 trop petit. En particulier ce couple de valeur doit être choisi de façon à avoir $\Delta\mathrm{T} << \mathrm{T}_{\mathrm{fusion}}$, où $\mathrm{T}_{\mathrm{fusion}}$ est la température de fusion du matériau. Considérons que toute l'énergie est absorbée par la couche d'or et que la diffusion de la chaleur est limitée par la conductivité du Silicium. Nous avons $\mathrm{K}_{Si} \simeq 140\,\mathrm{W/m/K}$ à 300 K [Weber, 2003], ainsi en considérant un faisceau de puissance 10 W et de rayon 100 µm avec une absorbance A = 0.1, nous avons une augmentation de la température de l'ordre de $\Delta\mathrm{T} \sim 30^{\circ}\mathrm{C} << \mathrm{T}_{\mathrm{fusion}}^{(Au)} = 1064^{\circ}\mathrm{C}$.

Pour une estimation plus précise, d'autres simulations sont nécessaires notamment en étudiant les propagations spatiale et temporelle de la chaleur lorsque le faisceau est focalisé sur la nanostructure.

Choix des matériaux

Maintenant que ces conditions préalables sur la structure sont inscrites dans le cahier des charges nous pouvons entamer l'optimisation de la géométrie.

Dans les deux configurations (structure plane ou réseau), nous souhaitons maximiser la pente de l'état excité afin de générer efficacement une barrière de potentiel. Cela revient à minimiser la distance δ_d définie en (3.12). D'après cette expression, cela revient à réduire la partie réelle de la permittivité du métal $|\varepsilon'_m|$, comme nous pouvons le constater sur la Fig.3.10(a), où nous avons tracé le profil évanescent de l'intensité du champ électrique pour différentes couches métalliques d'épaisseur 50 nm. De plus nous reportons les valeurs de l'intensité à l'interface métal/vide ($z = 0$) et la pente sur 50 nm (de z=50 à 100 nm) en Fig.3.10(b) et Fig.3.10(c), respectivement. L'argent semble ici le meilleur candidat pour maximiser le gradient d'intensité. En outre, il faut également vérifier la condition $|\varepsilon_i| > |\varepsilon_d|$, afin d'avoir une réflexion totale interne (cf. section 3.2.1). Par ailleurs nous devons prendre en compte les critères mentionnés précédemment : couche de métal éloignée des atomes, prisme et couche de diélectrique avec une faible absorption aux fréquences considérées (780 et 1529 nm).

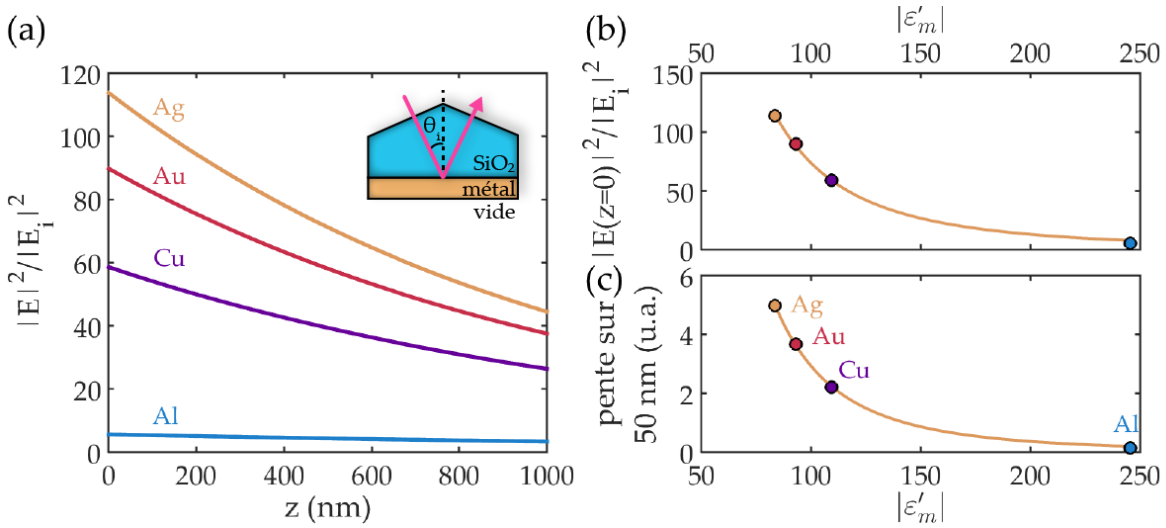


FIGURE 3.10 – **Influence du métal sur le profil évanescent de l'intensité du champ électrique.** (a) Tracés de la norme au carré du champ électrique $|E|^2$ (normalisée à l'onde incidente $|E_i|^2$) en fonction de la position z pour une onde incidente sur une couche de 50 nm d'argent (vert), d'or (rouge), de cuivre (violet) et d'aluminium (bleu). Nous considérons une onde incidente de longueur d'onde 1529.34 nm dans un milieu de SiO_2 (voir *inset*) et dont l'angle d'incidence est recalculé pour chaque configuration afin de satisfaire la condition de résonance plasmonique. Nous reportons également les valeurs de (b) l'intensité à l'interface métal/vide ($z = 0$) et (c) la pente sur 50 nm de l'intensité (mesurée de z=50 à 100 nm) en fonction de la norme absolue de la permittivité réelle, pour les différentes configurations de métal. Les courbes oranges sont des ajustements (b) en $1/|\varepsilon'_m|^{5/2}$ et (c) en $1/|\varepsilon'_m|^3$ pour estimer les tendances.

Concernant le métal, le choix s'est finalement orienté vers l'or, notamment car les simulations pour le transport d'atomes ont été réalisées avec ce matériau. Mais ce choix de matériau se justifie principalement par les techniques expérimentales employées par l'équipe réalisant ce type de fabrication. En effet, lors du processus de fabrication (cf. Fig.3.9), elle utilise la présence d'une couche en or sur un substrat de Silicium [D'Ortenzi et al., 2016].

Ensuite, concernant le prisme et le diélectrique, ils ont été choisis de façon à avoir $n_i > n_d$. L'optimisation de ces matériaux a montré que le plasmon était maximal lorsque la différence entre ces indices de réfraction était importante, en particulier pour le couple {Si,SiO_2} dont les indices valent {3.48,1.44} à cette fréquence [Palik, 1998]. De plus nous notons que les parties imaginaires de ces matériaux sont nulles, limitant ainsi les effets d'absorption de la chaleur. De plus, dans le cas d'une surface nanostructurée, l'oxydation des arêtes (1D) ou piliers (2D) extrudés permet d'obtenir du SiO_2 simplement.

Optimisation de la géométrie

Nous avons donc fixé le choix des matériaux de manière à avoir la configuration suivante : {Si,Au,SiO_2,vide}. Nous devons à présent optimiser la géométrie de la structure de sorte à maximiser le champ électrique généré par les SPs tout en gardant une géométrie réalisable expérimentalement. Nous commençons par optimiser la structure plane puis la structure avec un réseau 1D dans un second temps.

■ Surface stratifiée plane

Dans cette configuration, nous pouvons agir sur deux dimensions géométriques : les épaisseurs des couches de métal t_m et de diélectrique t_d. L'optimisation de cette première est importante afin de réaliser un transfert efficace de la quantité de mouvement de la lumière incidente au plasmon, tandis que la couche de diélectrique permet d'éloigner les atomes du métal afin de prévenir toute source de bruit électronique. Pour chaque couple de valeur (t_m,t_d) nous calculons l'angle d'incidence d'un faisceau laser à la longueur d'onde λ_{1529} = 1529.34 nm pour lequel la résonance plasmonique est maximale, *i.e.*, lorsque la décroissance exponentielle du SP est la plus forte. Ce dernier critère est estimé en mesurant la pente décroissante du module carré du champ électrique total $|E|^2 = |E_x|^2 + |E_z|^2$ sur une distance allant de $z = 50$ à 100 nm ($z = 0$ étant l'interface diélectrique/vide). Les résultats, obtenus avec Reticolo [Hugonin and Lalanne, 2005], sont reportés en Fig.3.11(a). Nous obtenons une pente maximale d'environ 14 u.a. (unités arbitraires) pour un angle incident $\theta_i \simeq 18.65^\circ$, une épaisseur d'or t_m=41 nm et une épaisseur de verre t_d =158 nm, dont la configuration finale est schématisée en Fig.3.11(b). La dimension t_m obtenue est caractéristique des épaisseurs des couches de métal maximisant le couplage dans cette configuration, typiquement on a des épaisseurs de 40-60 nm [Sarid and Challener, 2010], ce que nous avions pu constater également en Fig.3.6. Par ailleurs, avec cette épaisseur de diélectrique t_d obtenue, nous constatons que les effets du métal (bruit thermique et modification du taux de diffusion) sur les atomes devraient être négligeables, comme le montre les Fig.3.7 et Fig.3.8.

Nous présentons également en Fig.3.11(c) la réflectivité de l'onde à 1529 nm sur la surface plane en fonction de l'angle d'incidence θ_i (voir *inset*). Nous observons un minimum de la réflectivité pour un angle $\theta_i \simeq 18.7^\circ$, ce qui est proche de notre résultat précédent. Dans le cas présent nous avons en réalité une configuration avec deux diélectriques "en-dessous" du métal (verre + air) contrairement au cas habituel (en configuration de Kretschmann-Raether) où l'on considère seulement un diélectrique semi-infini. Ainsi nous pouvons calculer deux angles pour lesquels nous obtiendrions une résonance plasmonique : le premier dans le cas d'une configuration {Si,Au,SiO_2} où l'on trouverait un angle $\theta_{sp}^{(SiO2)} = 24.8^\circ$ et le second dans le cas {Si,Au,vide} où l'on aurait $\theta_{sp}^{(vide)} = 16.8^\circ$, représentés sur la figure en traits pointillés bleu et rouge, respectivement. Dans notre cas, nous n'avons pas un seul indice n_d pour le diélectrique mais plutôt une combinaison des indices $n_{SiO_2} = 1.44$ et $n_{vide} = 1$, ce qui modifie l'expression de l'angle de résonance (3.18). L'indice effectif n_{eff} qui permet de trouver un angle $\theta_{sp} \simeq 18.7^\circ$ vaut 1.12, ce qui est bien compris entre 1 et 1.44.

En Fig.3.11(d), nous présentons également le profil unidimensionnel selon (Oz) du module carré du champ électrique total $|E|^2$. Nous observons un premier profil évanescent du

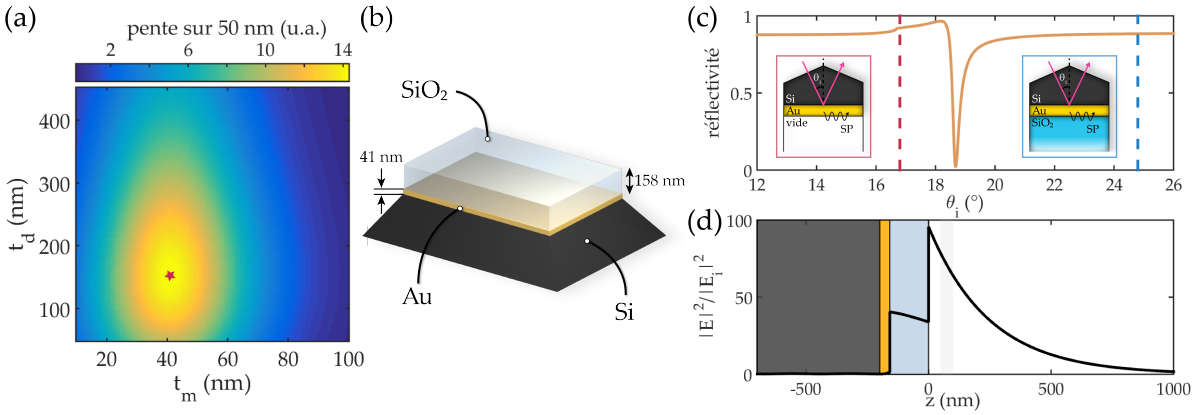


FIGURE 3.11 – **Optimisation géométrique de la surface plane stratifiée.** Un faisceau à 1529.34 nm est utilisé pour exciter des plasmons à l'interface métal/diélectrique d'un prisme composé de Si, Au et SiO_2. (a) La pente sur 50 nm du module au carré du champ (≡ intensité) est mesurée pour différentes épaisseurs d'or t_m et de verre t_d afin de trouver la géométrie pour laquelle la résonance plasmonique est maximale. L'angle permettant de maximiser cette dernière est recalculé pour chaque géométrie. L'étoile rouge correspond à la géométrie optimale avec une couche d'or de 41 nm et une épaisseur de diélectrique de 158 nm obtenue pour un angle $\theta_i = 18.65^\circ$. (b) Schéma de la configuration finale correspondante. (c) La réflectivité du faisceau à 1529 nm est calculée en fonction de l'angle d'incidence θ_i pour le profil déterminé précédemment. La réflectivité chute à 0 pour un angle $\theta_i \sim 18.7^\circ$, en adéquation avec notre résultat. (d) Le profil unidimensionnel selon (Oz) du module au carré du champ électrique normalisé au champ incident est tracé pour la géométrie optimale. Le rectangle grisé correspond à la zone sur laquelle la pente est optimisée. L'intensité est augmentée de près d'un facteur 100 à l'interface diélectrique/vide.

champ à l'interface métal/verre correspondant au plasmon de surface puis un deuxième à l'interface verre/vide. C'est ce dernier qui permettra de moduler l'état excité de l'atome de ^{87}Rb. L'ajustement de ce profil nous permet de calculer l'épaisseur de peau, soit ici $\delta_d \simeq 498$ nm. Dans ces simulations, l'amplitude du champ de l'onde incidente est normalisée à 1.L'augmentation de l'intensité des SPs est donc à peu près d'un facteur 100.

■ Surface stratifiée et nanostructurée à 1D

La géométrie de la structure à 1D est optimisée de la même manière. Les paramètres de l'optimisation sont les épaisseurs de métal t_m et de diélectrique t_d ainsi que la période du réseau ℓ et la largeur des fentes w_d. L'intérêt de notre méthode est de pouvoir réduire la période en-dessous de celle atteinte avec les réseaux en champ lointain. Nous fixons ainsi la période de notre structure à 100 nm. Nous considérons toujours un faisceau laser de pulsation $\omega^{(B)}_{1529}$ (B pour *Backward*) illuminant la structure par derrière (*i.e.*, toujours en configuration évanescente) avec un angle d'incidence θ_i. Ensuite nous balayons les dimensions du diélectrique (hauteur t_d et largeur w_d des arêtes) pour différentes épaisseurs de métal t_m en calculant la pente du champ évanescent sur 50 nm devant une arête, de la même manière que pour l'optimisation précédente. En Fig.3.12, nous présentons un balayage des dimensions du réseau diélectrique (hauteur t_d et largeur d'arête w_d) pour différentes épaisseur de couche métallique en or t_m. Nous trouvons un optimum pour une épaisseur d'or $t_m = 10$ nm. En effet les autres configurations ne nous permettent pas de réaliser un réseau à une dimension aux dimensions raisonnables (*i.e.*, w_d de quelques dizaines de nm).

Nous présentons les résultats de l'optimisation des dimensions du réseau diélectrique pour cette couche métallique en Fig.3.13(a). Nous trouvons une configuration optimale pour une hauteur de réseau $t_d = 500$ nm et une largeur $w_d = 25$ nm, lorsque l'angle d'incidence vaut $\theta_i \simeq 17.3^\circ$ et que la pente de $|E^{(B)}|^2$ vaut 2.64 u.a. (unités arbitraires). Le profil de la surface correspondante est présenté en Fig.3.13(b).

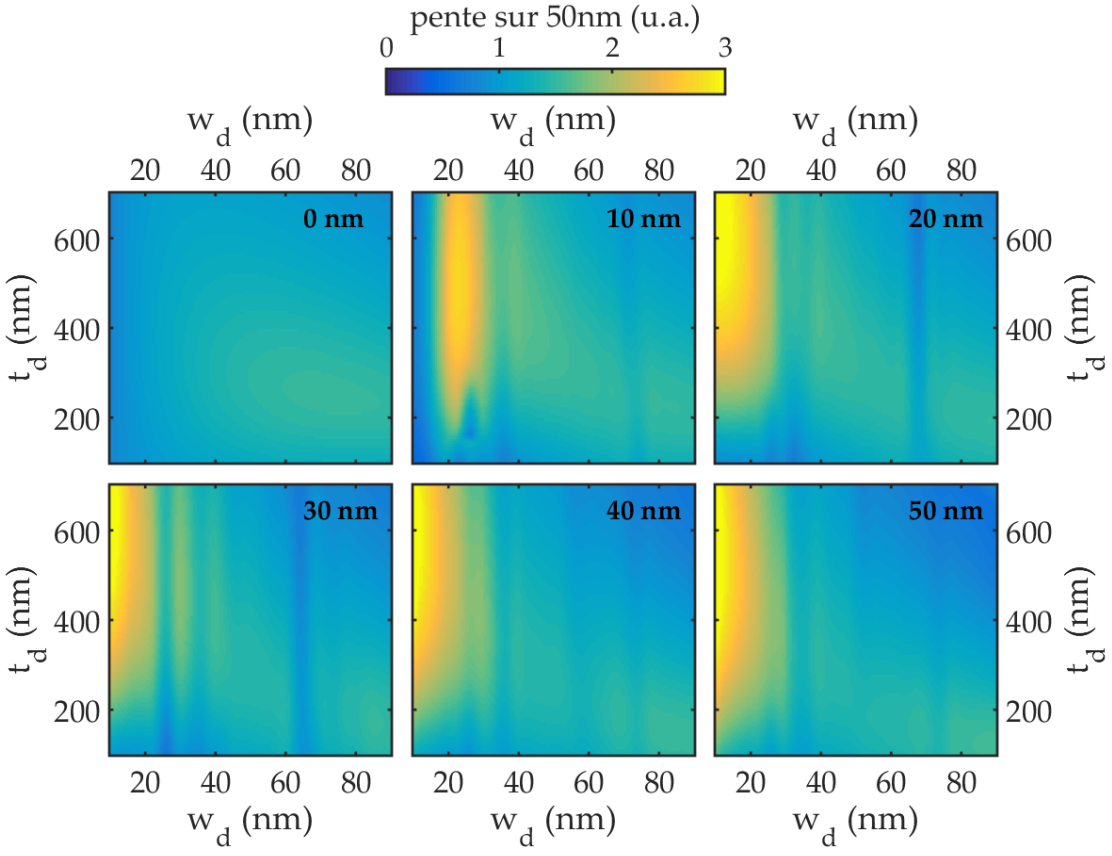


FIGURE 3.12 – **Optimisation géométrique de la couche de métal de la surface nanostructurée à 1D.** Évolution de la pente du gradient d'intensité sur 50 nm en fonction de la hauteur t_d et de la largeur d'arête w_d du réseau diélectrique pour différentes épaisseurs d'or t_m. De gauche à droite, et de haut en bas : t_m=(0 nm, 10 nm, 20 nm) ; (30 nm, 40 nm, 50 nm).

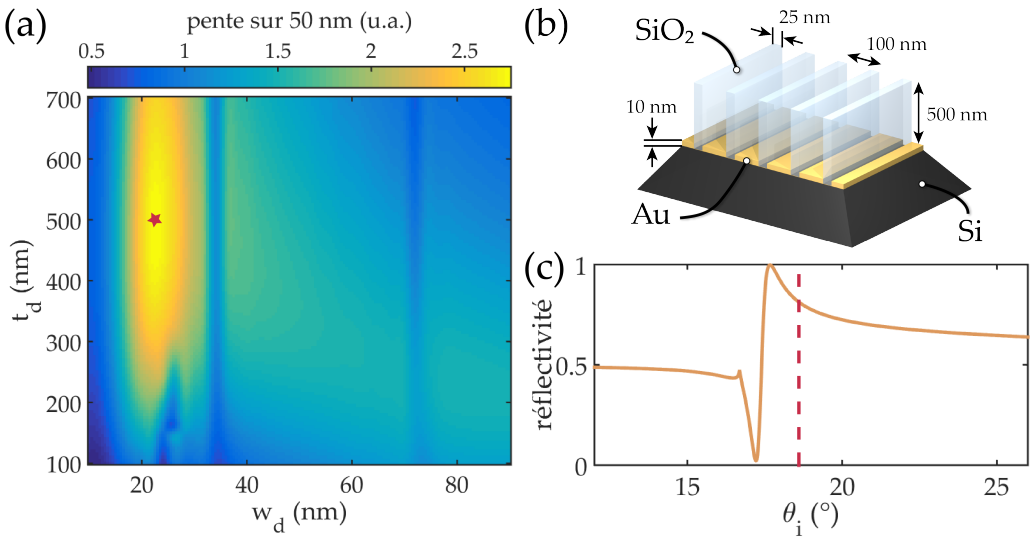


FIGURE 3.13 – **Optimisation géométrique de la surface stratifiée et structurée à 1D.** (a) La géométrie de la structure stratifiée est optimisée en balayant la hauteur t_d et la largeur w_d du réseau diélectrique en verre pour une épaisseur d'or $t_m = 10$ nm. La pente du profil spatial du module au carré du champ total $\left|E^{(B)}\right|^2$ sur 50 nm au-dessus d'une arête du réseau est calculée, de la même manière que pour le cas précédent. L'étoile rouge correspond à la configuration finale obtenue pour un angle $\theta \simeq 17.3^\circ$ avec une pente d'environ 2.64 u.a. (unités arbitraires). (b) Schéma de la nanostructure correspondante à l'optimum (étoile rouge) avec un substrat de Si, une fine couche d'or de 10 nm et un réseau de SiO_2 avec des arêtes de 500 nm de hauteur et 25 nm de large. (c) Évolution de la réflectivité d'une onde à 1529.34 nm incidente à un angle θ_i côté prisme. Le trait pointillé rouge correspond à l'angle théorique calculée pour un indice effectif défini par (3.26).

Dans cette configuration le métal est également structuré avec une période identique à celle du réseau diélectrique, ceci afin de faciliter la fabrication (cf. méthode de fabrication ci-dessus). Les SPs sont ici excités à la fois par la réflexion totale interne mais également par la présence du réseau 1D. En Fig.3.13(c) nous constatons une chute de la réflectivité pour un angle $\theta_i \simeq 17.2^\circ$, en adéquation avec notre optimisation. Nous pouvons réaliser un calcul théorique en prenant un indice effectif du milieu où le réseau se trouve (verre + vide) donné par

$$n_{d,eff} \simeq n_{Si0_2} \frac{w_d}{\ell} + \left(1 - \frac{w_d}{\ell}\right) n_{vide}, \tag{3.26}$$

où le rapport w_d/ℓ correspond à la fraction représentative de la présence du diélectrique dans la couche d'épaisseur t_d. Avec les dimensions obtenues ce rapport vaut $1/4$ et on trouve un indice $n_{d,eff} \sim 1.11$, soit d'après (3.18) un angle de résonance $\theta_{sp} \sim 18.6^\circ$ (trait pointillé rouge), ce qui assez proche de notre résultat. Cela signifie que les plasmons sont excités principalement par la réflexion totale interne.

Par ailleurs, la précision des calculs des champs électromagnétiques dépend du nombre d'harmoniques de Fourier N_h choisi. En effet, ce nombre permet de décomposer les champs dans les modes du réseau. Les champs électrique et magnétique s'écrivent comme une somme de N_h termes (harmoniques) pour décrire leur variation spatiale. Un nombre élevé d'harmoniques signifie donc une description des champs plus précise. Ainsi, plus le nombre N_h sera élevé plus le calcul sera précis mais plus il prendra de temps et de mémoire en contrepartie. La convergence des calculs en fonction du nombre N_h est présentée en Fig.3.14(a), où nous avons tracé l'erreur relative sur la pente de l'intensité sur 50 nm (cf. optimisations précédentes). D'après ces résultats, nous décidons de fixer $N_h = 71$ (point rouge) pour les tracés de champs électromagnétiques dans cette configuration 1D, de façon à avoir une erreur inférieure à 1% (zone bleue). Avec cette valeur fixée, nous traçons le profil bidimensionnel du module au carré du champ électrique en Fig.3.14(b), où l'on distingue la présence de

plasmons localisés sur les arêtes du réseau. Ce type de plasmons est notamment rencontré avec des réseaux de nanoparticules [Sarid and Challener, 2010].

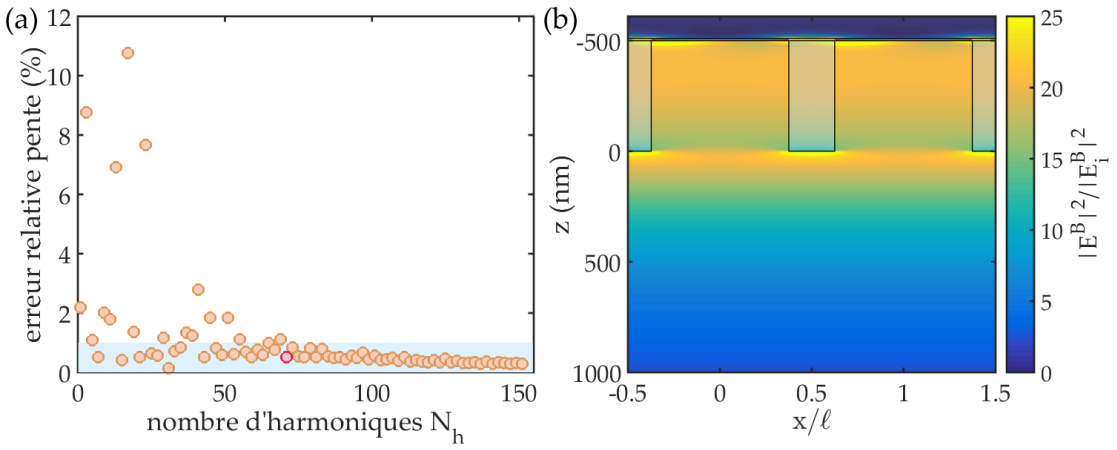


FIGURE 3.14 – **Étude de convergence sur le nombre d'harmoniques et tracé du profil spatial de l'intensité.** (a) Erreur relative sur la pente mesurée pour les optimisations en fonction du nombre d'harmoniques N_h. La valeur de référence est calculée pour $N_h = 1001$, nombre arbitraire pour lequel nous jugeons que les simulations ont convergé. Les champs électromagnétiques seront tracés en prenant $N_h = 71$ (point rouge), valeur pour laquelle l'erreur est inférieure à 1% (zone bleue). (b) Profil bidimensionnel du module au carré du champ électrique total normalisé au champ incident (dont l'amplitude est normalisée à l'unité) pour la configuration 1D optimisée (soit une période ℓ =100 nm), avec $N_h = 71$. Simulations réalisées avec Reticolo.

Nous reportons en Fig.3.15(a) les coupes unidimensionnelles pour $x = 0$ qui correspond à la position entre deux arêtes (trait pointillé) et $x = \ell/2$ qui correspond à la position d'une arête (trait plein). Pour cette dernière position (à laquelle l'optimisation a été réalisée), nous observons bien le profil évanescent du champ à l'interface verre/vide ($z = 0$). En revanche, entre deux arêtes on observe un rebond car il n'existe plus d'interface verre/vide à cette position. Or la méthode de piégeage nécessite une pente décroissante tout le long de l'interface afin d'empêcher les atomes de se diriger vers la surface. Pour remédier à ce problème, nous utilisons un second laser à une fréquence $\omega^{(F)}_{1529} = \omega^{(B)}_{1529} + \delta^{(F)}_{1529}$ (F pour *Forward*) envoyée du côté de la face avant de la surface (*i.e.*, côté réseau) avec une incidence normale. C'est ce laser qui génèrera la décroissance souhaitée entre les arêtes. Nous paramétrons l'intensité de ce second laser F relativement à l'intensité du laser B en définissant un facteur multiplicatif $\alpha^{(F)}_{1529}$ tel que $\left|E^{(F)}\right|^2 = \alpha^{(F)}_{1529}\left|E^{(B)}\right|^2$. Ainsi, en prenant un faisceau en face avant (F) avec une intensité 4 fois plus élevée que celui en face arrière (B), *i.e.*, $\alpha^{(F)}_{1529} = 4$, l'onde est réfléchie par le métal et nous obtenons le profil spatial tracé en Fig.3.15(b). Nous constatons alors une tendance inverse entre les profils d'intensité des deux lasers. L'intensité du laser F présente une pente décroissante entre deux arêtes (trait pointillé) et un rebond au dessus de l'interface verre/vide (trait plein). Le léger décalage en fréquence $\delta^{(F)}_{1529}$ permet de moyenner temporellement les interférences. Ainsi l'intensité résultante correspond à la somme des deux intensités des faisceaux, représentée en Fig.3.15(c).

Les géométries des nanostructures étant maintenant optimisées il faut calculer les déplacements des niveaux d'énergie d'un atome en champ proche de la structure induits par ces faisceaux lasers. Les modes du champ électromagnétique vont interagir avec le moment dipolaire de l'atome et modifier ses états internes. C'est ce que nous allons évaluer dans la partie suivante.

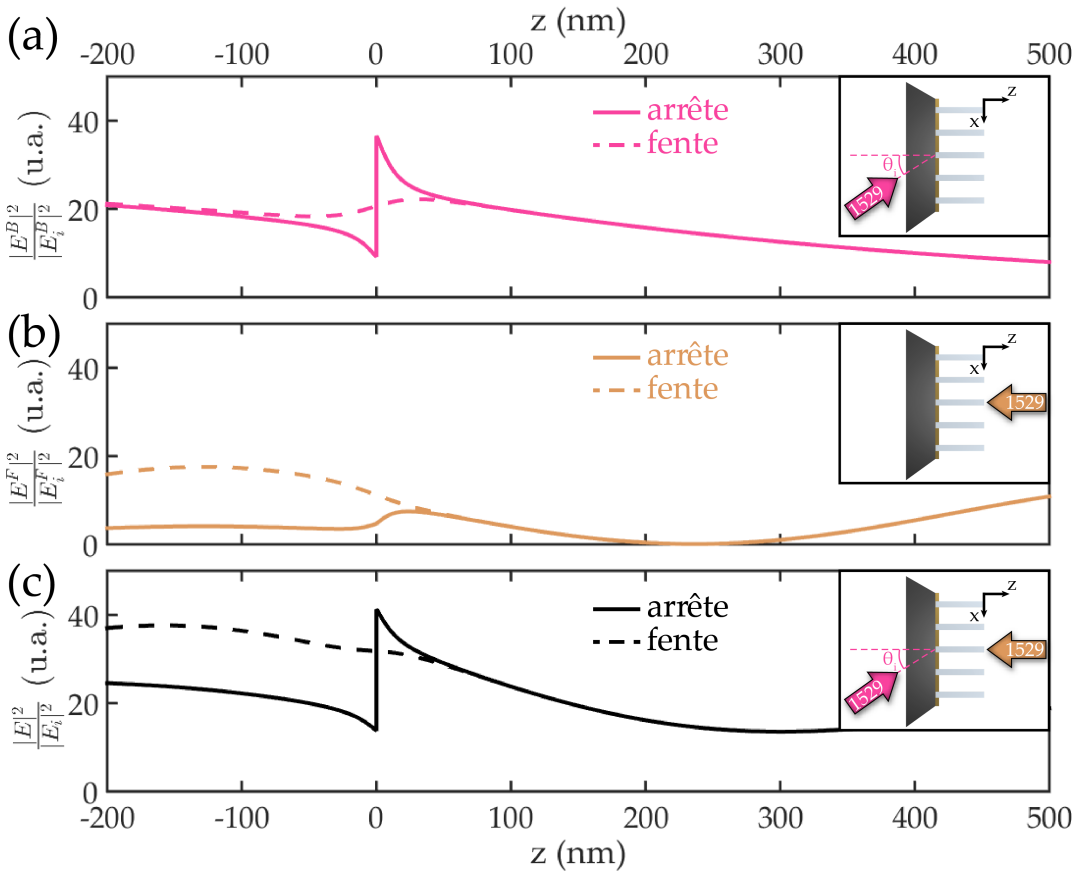


FIGURE 3.15 – **Configuration optique du piégeage à 1D : profils unidimensionnels des intensités lasers à 1529 nm.** (a) Un laser à 1529.34 nm (rose), noté B, est envoyée en face arrière (côté prisme) avec un angle θ_i afin d'obtenir une résonance plasmonique (voir *inset*). L'évolution spatiale selon (Oz) du module au carré du champ électrique total $\left|E^{(B)}\right|^2$ au-dessus d'une arête (trait plein rose) donne un profil évanescent, point clé de la méthode, ce qui n'est pas le cas pour le profil de l'intensité au-dessus d'une fente (trait pointillé rose). (b) Un second laser noté F, légèrement décalé en fréquence du premier (B) et possédant une intensité 4 fois plus élevée, est envoyé en face avant (côté réseau) à incidence normale (voir *inset*). Les profils des intensités selon (Oz) pour les deux positions sont inversés par rapport au cas précédent : le champ décroit vers les z positifs au-dessus d'une fente (trait pointillé orange) tandis que l'on observe un rebond au-dessus d'une arête (trait plein orange). (c) En utilisant les deux lasers de fréquences légèrement différentes (voir *inset*), les intensités sont sommées et permettent d'obtenir des profils qui décroissent selon (Oz) à la fois au-dessus d'une arête (trait plein noir) et au-dessus d'une fente (trait pointillé noir).

3.3 Interaction atome-champ : effet Stark dynamique

Nous nous intéressons ici aux modifications des niveaux d'énergie d'un atome de ^{87}Rb en présence d'un champ électrique extérieur, de manière analogue à l'effet Zeeman qui provoque une levée de dégénérescence des niveaux hyperfins lorsqu'un champ magnétique extérieur est appliqué. Ce phénomène est communément appelé effet Stark [Stark, 1914]. Nous présentons dans cette section le formalisme de l'effet Stark et son application à notre cas d'intérêt.

3.3.1 Hamiltoniens

Tout d'abord nous définissons les hamiltoniens utilisés pour ces calculs. Comme nous le verrons ci-après, les déplacements lumineux des états atomiques seront plus ou moins importants comparés à la structure hyperfine de l'atome, nous poussant à choisir la base adaptée (structure fine ou hyperfine) pour calculer la perturbation résultante.

Atome

Nous considérons un atome dans son état fondamental $|g\rangle$ décrit par le hamiltonien (1.28), dont nous rappelons l'expression :

$$\hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{A}} = \frac{\mathbf{p}_{\mathrm{A}}^2}{2m_{\mathrm{A}}} + \sum_e \hbar\omega_{eg} |e\rangle\langle e|, \tag{3.27}$$

où $\mathbf{p}_{\mathrm{A}}$ et m_{A} sont respectivement la quantité de mouvement et la masse de l'atome, et $\omega_{eg} = (\mathrm{E}_e - \mathrm{E}_g)/\hbar$ représente la fréquence de transition entre l'état fondamental $|g\rangle$ et un état excité $|e\rangle$.

Structure hyperfine

La structure hyperfine résulte du couplage entre le moment cinétique électronique total $\mathbf{J}$ et le moment cinétique nucléaire $\mathbf{I}$. Le hamiltonien qui décrit la structure hyperfine de l'atome est donné par [Arimondo et al., 1977]

$$\hat{\mathscr{H}}_{hfs} = \mathrm{A}_{hfs}\hat{\mathbf{I}}\cdot\hat{\mathbf{J}} + \mathrm{B}_{hfs}\frac{3\left(\hat{\mathbf{I}}\cdot\hat{\mathbf{J}}\right)^2 + \frac{3}{2}\hat{\mathbf{I}}\cdot\hat{\mathbf{J}} - \mathrm{I}(\mathrm{I}+1)\,\mathrm{J}(\mathrm{J}+1)}{2\mathrm{I}(2\mathrm{I}-1)\,2\mathrm{J}(2\mathrm{J}-1)}, \tag{3.28}$$

où A_{hfs} et B_{hfs} sont les constantes de structure hyperfine, dont les valeurs pour les états $5\mathrm{S}_{1/2}$ et $5\mathrm{P}_{3/2}$ sont données dans le Tableau 3.1.

État	$\mathbf{5S_{1/2}}$	$\mathbf{5P_{3/2}}$
$\mathbf{A_{hfs}}$	$2\pi\cdot$ 3.417 341 GHz	$2\pi\cdot$ 84.7185 MHz
$\mathbf{B_{hfs}}$	0	$2\pi\cdot$ 12.4965 MHz

TABLEAU 3.1 – **Constantes dipolaire magnétique A_{hfs} et quadrupolaire électrique B_{hfs} du ^{87}Rb**, tirées de [Steck, 2001].

Interaction atome-champ électromagnétique

L'interaction entre l'atome positionné en $\mathbf{r}_{\mathrm{A}}$ et le champ, en se plaçant dans l'approximation des grandes longueurs d'ondes et en négligeant les interactions magnétiques, est caractérisée par le hamiltonien d'interaction dipolaire-électrique (1.29), soit

$$\hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{AF}} = -\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r}_{\mathrm{A}}), \tag{3.29}$$

avec l'opérateur moment dipolaire défini par

$$\hat{\mathbf{d}} = \sum_e \left(\mathbf{d}_{ge}\hat{\sigma} + \mathbf{d}_{eg}\hat{\sigma}^\dagger \right) \tag{3.30}$$

où $\mathbf{d}_{ge} = \langle g|\mathbf{d}|e\rangle = -e\langle g|\mathbf{r}|e\rangle$ et $\hat{\sigma} = |g\rangle\langle e|$. L'opérateur $\hat{\sigma}$ ($\hat{\sigma}^\dagger$) est défini comme l'opérateur de descente (de montée) car il fait passer l'atome d'un état excité e (état fondamental g) à l'état fondamental g (état excité e).

3.3.2 Polarisabilité atomique

Quand un atome est placé dans un champ électrique $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, les trajectoires (orbitales) de l'électron périphérique sont modifiées par la présence de ce champ. L'atome présente alors un moment dipolaire $\mathbf{d}(\mathbf{r}, t)$ induit par le champ électrique et qui oscille à la fréquence du champ ω :

$$\mathbf{d}(\mathbf{r}, t) = \alpha(\omega)\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \tag{3.31}$$

où $\alpha(\omega)$ est la polarisabilité de l'atome. Elle décrit à quel point le champ électrique induit un moment dipolaire atomique, soit encore la réponse de l'atome au champ appliqué. Le calcul de l'expression de la polarisabilité atomique est présenté en Annexe B. On montre ainsi que la polarisabilité de l'état fondamental est donnée par (B.16), dont nous rappelons le résultat :

$$\boldsymbol{\alpha}_g(\omega) = \sum_e \frac{2\omega_{eg}\mathbf{d}_{ge}\mathbf{d}_{eg}}{\hbar\left(\omega_{eg}^2 - \omega^2\right)}. \tag{3.32}$$

Pour un atome dans un état hyperfin quelconque défini par $|\mathrm{L\ J\ I\ F}\ m_\mathrm{F}\rangle \equiv |\beta\ \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}\rangle$, où β dénote les autres nombres quantiques (e.g., propriétés radiales et orbitales), nous pouvons réécrire la polarisabilité de la façon suivante :

$$\alpha(\omega;\beta\ \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}) = \sum_{\beta',\mathrm{F}',m'_\mathrm{F},q} \frac{2\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}\left|\langle\ \beta\ \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}\ |\ \hat{d}_q\cdot\epsilon_q\ |\ \beta'\ \mathrm{F}'\ m'_\mathrm{F}\ \rangle\right|^2}{\hbar(\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}^2 - \omega^2)}, \tag{3.33}$$

avec $\boldsymbol{\epsilon} = (\epsilon_{-1}, \epsilon_0, \epsilon_1)$, où nous posons $\epsilon_{\pm1} = (\mp\epsilon_x - i\epsilon_y)/\sqrt{2}$ et $\epsilon_0 = \epsilon_z$ les composantes tensorielles sphériques du vecteur polarisation $\boldsymbol{\epsilon} = (\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z)$ dans le repère cartésien $\{x, y, z\}$. $\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}$ est la fréquence entre les niveaux hyperfins F et F′. L'élément $\langle\ \beta\ \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}\ |\ \hat{d}_q\cdot\epsilon_q\ |\ \beta'\ \mathrm{F}'\ m'_\mathrm{F}\ \rangle$ est calculé en Annexe B.

En notation tensorielle, nous pouvons mettre (3.33) sous la forme

$$\alpha_{\mu\nu}(\omega;\beta\ \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}) = \sum_{\beta',\mathrm{F}',m'_\mathrm{F}} \frac{2\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}\langle\ \beta\ \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}\ |\ d_\mu\ |\ \beta'\ \mathrm{F}'\ m'_\mathrm{F}\ \rangle\langle\ \beta'\ \mathrm{F}'\ m'_\mathrm{F}\ |\ d_\nu\ |\ \beta\ \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}\ \rangle}{\hbar(\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}^2 - \omega^2)}. \tag{3.34}$$

Pour étudier l'influence des orientations du champ et de l'atome, nous développons la polarisabilité (3.34) en parties irréductibles. Ainsi, si nous posons

$$\mathrm{T}_{\mu\nu} \coloneqq \sum_{m'_\mathrm{F}} \langle\ \beta\ \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}\ |\ d_\mu\ |\ \beta'\ \mathrm{F}'\ m'_\mathrm{F}\ \rangle\langle\ \beta'\ \mathrm{F}'\ m'_\mathrm{F}\ |\ d_\nu\ |\ \beta\ \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}\ \rangle, \tag{3.35}$$

nous pouvons décomposer ce tenseur d'ordre 2 sous la forme

$$\mathrm{T}_{\mu\nu} = \frac{1}{3}\mathrm{T}^{(0)}\delta_{\mu\nu} + \frac{1}{4}\mathrm{T}^{(1)}_\sigma\epsilon_{\sigma\mu\nu} + \mathrm{T}^{(2)}_{\mu\nu}, \tag{3.36}$$

avec respectivement les parties scalaire, vectorielle et tensorielle

$$\mathrm{T}^{(0)} = \mathrm{T}_{\mu\mu}, \tag{3.37}$$

$$\mathrm{T}^{(1)}_\sigma = \epsilon_{\sigma\mu\nu}\left(\mathrm{T}_{\mu\nu} - \mathrm{T}_{\nu\mu}\right), \tag{3.38}$$

$$\mathrm{T}^{(2)}_{\mu\nu} = \mathrm{T}_{(\mu\nu)} - \frac{1}{3}\mathrm{T}_{\sigma\sigma}\delta_{\mu\nu}. \tag{3.39}$$

$\delta_{\mu\nu}$ est le symbole de Kronecker ($\delta_{\mu\nu} = 1$ si $\mu = \nu$ ou 0 si $\mu \neq \nu$) et $\epsilon_{\sigma\mu\nu}$ est le symbole de Levi-Civita. Les relations (3.35), (3.37), (3.38) et (3.39) ont été définies d'après les propriétés des tenseurs sphériques (voir par exemple Chapitre 7 de [Steck, 2007]). Nous donnons ici directement les résultats des calculs permettant d'obtenir l'expression de ces différents termes, pour plus de détails on pourra consulter la Section 7.7.2, Chapitre 7 de [Steck, 2007].

Partie scalaire

On peut montrer que

$$T^{(0)} = \left|\langle \alpha\ F||\mathbf{d}||\alpha'\ F'\rangle\right|^2, \tag{3.40}$$

où le dipôle réduit $\left|\langle \alpha\ F||\mathbf{d}||\alpha'\ F'\rangle\right|$ est donné par (B.22).

Partie vectorielle

On montre également que la partie vectorielle, en coordonnées tensorielles sphériques, donne

$$T^{(1)}_q = (-1)^{F+F'}(-i)\sqrt{\frac{24(2F+1)}{F(F+1)}}\begin{Bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ F & F & F' \end{Bmatrix}\left|\langle \alpha\ F||\mathbf{d}||\alpha'\ F'\rangle\right|^2 m_F \delta_{q0}. \tag{3.41}$$

Les indices en lettres grecques (resp. romaines) correspondent aux composantes cartésiennes (resp. sphériques).

Partie tensorielle

De la même manière on trouve l'expression suivante pour la partie tensorielle :

$$T^{(2)}_q = (-1)^{F+F'}(-i)\sqrt{\frac{5(2F+1)}{F(F+1)(2F-1)(2F+3)}}\begin{Bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ F & F & F' \end{Bmatrix}\left|\langle \alpha\ F||\mathbf{d}||\alpha'\ F'\rangle\right|^2 \left[m_F^2 - F(F+1)\right]\delta_{q0}. \tag{3.42}$$

3.3.3 Déplacement énergétique : traitement semi-classique

Nous nous intéressons maintenant aux déplacements énergétiques par effet Stark dynamique en tenant compte de la structure hyperfine de l'atome de ^{87}Rb [Angel and Sandars, 1968; Khadjavi et al., 1968; Schmieder, 1972]. Nous étudions tout d'abord les décalages énergétiques de l'atome sous l'influence d'un champ électrique faible puis d'un champ fort, pour enfin traiter la solution exacte (pour des champs intermédiaires).

Perturbation en champ faible

Nous considérons un atome auquel un champ électrique à la fréquence ω est appliqué. Nous rappelons que l'interaction correspondante est donnée par (3.29), soit

$$\hat{\mathscr{H}}_{Stark} = -\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{E}. \tag{3.43}$$

Pour des champs faibles, nous considérons le hamiltonien (3.43) comme une perturbation de la structure hyperfine. D'après la théorie des perturbations au second ordre, le déplacement énergétique d'un état hyperfin $|F\ m_F\rangle$ est donné par

$$\Delta E^{Stark}_{F,m_F} = \langle F\ m_F|\hat{\mathscr{H}}_{Stark}|F\ m_F\rangle + \sum_{F',m'_F}\frac{\left|\langle F\ m_F|\hat{\mathscr{H}}_{Stark}|F'\ m'_F\rangle\right|^2}{E_{F,m_F} - E_{F',m'_F}}, \tag{3.44}$$

où $|\mathrm{F}'\ m'_\mathrm{F}\rangle$ dénote les autres états atomiques avec lesquels il existe une transition. L'opérateur dipolaire étant impair, il ne couple que les états de parité opposée, ainsi le premier terme à droite de l'égalité (3.44) est nul.

Nous avons vu que la polarisabilité (3.34) était définie par la relation (B.15) (au premier ordre), soit encore

$$\langle d_\mu^{(+)}(\omega)\rangle = \alpha_{\mu\nu}(\omega)\left(\mathrm{E}_0^{(+)}\right)_\nu . \tag{3.45}$$

Ainsi, d'après la forme de l'interaction dipolaire-électrique (3.43), le déplacement énergétique de l'état $|\mathrm{F}\ m_\mathrm{F}\rangle$ est (cf. (B.14))

$$\Delta\mathrm{E}(\mathrm{F}, m_\mathrm{F};\omega) = -\mathrm{Re}\left[\alpha_{\mu\nu}(\mathrm{F}, m_\mathrm{F};\omega)\right]\left(\mathrm{E}_0^{(-)}\right)_\mu\left(\mathrm{E}_0^{(+)}\right)_\nu . \tag{3.46}$$

Avec l'expression de la polarisabilité (3.34) et du tenseur (3.35), nous écrivons ce déplacement de la manière suivante :

$$\begin{aligned}\Delta\mathrm{E}(\mathrm{F}, m_\mathrm{F};\omega) &= \sum_{\mathrm{F}'}\frac{2\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}}{\hbar(\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}^2-\omega^2)}\mathrm{T}_{\mu\nu}\left(\mathrm{E}_0^{(-)}\right)_\mu\left(\mathrm{E}_0^{(+)}\right)_\nu \\ &= \sum_{\mathrm{F}'}\frac{2\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}}{\hbar(\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}^2-\omega^2)}\left[\frac{1}{3}\mathrm{T}^{(0)}\left[\mathrm{E}_0^{(-)}\mathrm{E}_0^{(+)}\right]^{(0)} + \frac{1}{4}\mathrm{T}_\sigma^{(1)}(-i\sqrt{2})\left[\mathrm{E}_0^{(-)}\times\mathrm{E}_0^{(+)}\right]_0^{(1)} + \mathrm{T}_0^{(2)}\left[\mathrm{E}_0^{(-)}\mathrm{E}_0^{(+)}\right]_0^{(2)}\right],\end{aligned} \tag{3.47}$$

où nous avons utilisé les propriétés des tenseurs suivantes : $\mathrm{T}_0^{(0)} = -\mathbf{A}\cdot\mathbf{B}/\sqrt{3}$ et $\mathrm{T}_q^{(1)} = i(\mathbf{A}\times\mathbf{B})_q/\sqrt{2}$, où $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$ sont des opérateurs vectoriels. Avec la notation des tenseurs sphériques, seule la composante $q = 0$ survit ici.

Finalement, avec les expressions (3.40), (3.41) et (3.42), le déplacement énergétique par effet Stark est le suivant :

$$\begin{aligned}\Delta\mathrm{E}(\mathrm{F}, m_\mathrm{F};\omega) = &-\alpha^{(0)}(\mathrm{F};\omega)\left|\mathrm{E}_0^{(+)}\right|^2 - \alpha^{(1)}(\mathrm{F};\omega)\left[i\mathrm{E}_0^{(-)}\times\mathrm{E}_0^{(+)}\right]_z\frac{m_\mathrm{F}}{\mathrm{F}} \\ &- \frac{1}{2}\alpha^{(2)}(\mathrm{F};\omega)\left(3\left|\mathrm{E}_{0z}^{(+)}\right|^2 - \left|\mathrm{E}_0^{(+)}\right|^2\right)\left(\frac{3m_\mathrm{F}^2-\mathrm{F}(\mathrm{F}+1)}{\mathrm{F}(2\mathrm{F}-1)}\right),\end{aligned} \tag{3.48}$$

avec les polarisabilités scalaire, vectorielle et tensorielle définies par

$$\alpha^{(0)}(\omega;\mathrm{F}) = \sum_{\mathrm{F}'}\frac{2\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}\left|\langle\ \mathrm{F}\ ||\hat{\mathbf{d}}||\ \mathrm{F}'\ \rangle\right|^2}{3\hbar(\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}^2-\omega^2)}, \tag{3.49}$$

$$\alpha^{(1)}(\omega;\mathrm{F}) = \sum_{\mathrm{F}'}(-1)^{\mathrm{F}+\mathrm{F}'+1}\sqrt{\frac{6(2\mathrm{F}+1)}{\mathrm{F}(\mathrm{F}+1)}}\begin{Bmatrix}1 & 1 & 1\\ \mathrm{F} & \mathrm{F} & \mathrm{F}'\end{Bmatrix}\frac{\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}\left|\langle\ \mathrm{F}\ ||\hat{\mathbf{d}}||\ \mathrm{F}'\ \rangle\right|^2}{3\hbar(\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}^2-\omega^2)}, \tag{3.50}$$

$$\alpha^{(2)}(\omega;\mathrm{F}) = \sum_{\mathrm{F}'}(-1)^{\mathrm{F}+\mathrm{F}'}\sqrt{\frac{40(2\mathrm{F}+1)(2\mathrm{F}-1)}{3(\mathrm{F}+1)(2\mathrm{F}+3)}}\begin{Bmatrix}1 & 1 & 2\\ \mathrm{F} & \mathrm{F} & \mathrm{F}'\end{Bmatrix}\frac{\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}\left|\langle\ \mathrm{F}\ ||\hat{\mathbf{d}}||\ \mathrm{F}'\ \rangle\right|^2}{3\hbar(\omega_{\mathrm{F}'\mathrm{F}}^2-\omega^2)}, \tag{3.51}$$

où l'élément $\langle\ \mathrm{F}\ ||\hat{\mathbf{d}}||\ \mathrm{F}'\ \rangle$ est donné par (B.22).

Dans nos simulations, nous avons considéré un champ électrique polarisé linéairement, avec $\mathbf{E} = \mathrm{E}_z\mathbf{z}$, nous avons alors $\left[i\mathrm{E}_0^{(-)}\times\mathrm{E}_0^{(+)}\right]_z = 0$. Le déplacement (3.48) se réduit alors à l'expression suivante :

$$\Delta\mathrm{E}(\mathrm{F}, m_\mathrm{F};\omega) = -\frac{1}{2}\alpha^{(0)}(\mathrm{F};\omega)\,|\mathrm{E}_z|^2 - \frac{1}{2}\alpha^{(2)}(\mathrm{F};\omega)\left(\frac{3m_\mathrm{F}^2-\mathrm{F}(\mathrm{F}+1)}{\mathrm{F}(2\mathrm{F}-1)}\right)|\mathrm{E}_z|^2, \tag{3.52}$$

où nous avons remplacé l'amplitude rms du champ $\mathrm{E}_{0z}^{(+)}$ par son expression en fonction de l'amplitude E_z, soit $\mathrm{E}_{0z}^{(+)} = \mathrm{E}_z/\sqrt{2}$. Avec une telle notation pour l'amplitude du champ, l'intensité optique est donnée par $\mathrm{I} = \varepsilon_0 c|\mathrm{E}_z|^2/2$.

Ainsi le hamiltonien correspondant s'écrit

$$\hat{\mathscr{H}}_{Stark}(\mathrm{F}) = -\frac{1}{2}\alpha^{(0)}(\mathrm{F};\omega)\,|\mathrm{E}_z|^2 - \frac{1}{2}\alpha^{(2)}(\mathrm{F};\omega)\left(\frac{3\mathrm{F}_z^2-\mathbf{F}^2}{\hbar^2\mathrm{F}(2\mathrm{F}-1)}\right)|\mathrm{E}_z|^2 . \tag{3.53}$$

Perturbation en champ fort

Pour des champs forts, le nombre quantique F n'est plus adapté car les décalages énergétiques deviennent grands par rapport à la structure hyperfine mais négligeables devant la structure fine. Il faut réécrire le hamiltonien (3.53) en fonction du nombre quantique J, ce qui donne simplement

$$\hat{\mathscr{H}}_{Stark}(\mathrm{J}) = -\frac{1}{2}\alpha^{(0)}(\mathrm{J};\omega)\,|\mathrm{E}_z|^2 - \frac{1}{2}\alpha^{(2)}(\mathrm{J};\omega)\left(\frac{3\mathrm{J}_z^2-\mathbf{J}^2}{\hbar^2\mathrm{J}(2\mathrm{J}-1)}\right)|\mathrm{E}_z|^2, \tag{3.54}$$

où nous avons les polarisabilités scalaire et tensorielle suivantes [Porsev et al., 1999] :

$$\alpha^{(0)}(\mathrm{J};\omega) = -\frac{2}{3(2\mathrm{J}+1)}\sum_{\mathrm{J}'}\frac{\omega_{\mathrm{J}'\mathrm{J}}\left|\langle\,\mathrm{J}\,||\,\hat{\mathbf{d}}\,||\,\mathrm{J}'\,\rangle\right|^2}{\hbar(\omega_{\mathrm{J}'\mathrm{J}}^2-\omega^2)}, \tag{3.55}$$

$$\alpha^{(2)}(\mathrm{J};\omega) = \sqrt{\frac{40\mathrm{J}(2\mathrm{J}-1)}{3(2\mathrm{J}+3)(2\mathrm{J}+1)(\mathrm{J}+1)}}\sum_{\mathrm{J}'}(-1)^{\mathrm{J}+\mathrm{J}'+1}\left\{\begin{array}{ccc}\mathrm{J} & 1 & \mathrm{J}'\\ 1 & \mathrm{J} & 2\end{array}\right\}\frac{\omega_{\mathrm{J}'\mathrm{J}}\left|\langle\,\mathrm{J}\,||\,\hat{\mathbf{d}}\,||\,\mathrm{J}'\,\rangle\right|^2}{\hbar(\omega_{\mathrm{J}'\mathrm{J}}^2-\omega^2)}. \tag{3.56}$$

Nous constatons que le hamiltonien (3.54) est diagonal dans la base $|\mathrm{J}\ m_\mathrm{J}\rangle$ [3].

Nous pouvons ainsi traiter le hamiltonien $\hat{\mathscr{H}} = \hat{\mathscr{H}}_{hfs} + \hat{\mathscr{H}}_{Stark}(\mathrm{J})$ comme une perturbation de la structure fine, où le hamiltonien de la structure hyperfine $\hat{\mathscr{H}}_{hfs}$ est donné par (3.28). Le décalage d'un état $|\mathrm{J}\ m_\mathrm{J}\rangle$ vaut alors

$$\langle \mathrm{J}\ m_\mathrm{J}|\,\hat{\mathscr{H}}\,|\mathrm{J}'\ m'_\mathrm{J}\rangle = \langle \mathrm{J}\ m_\mathrm{J}|\,\hat{\mathscr{H}}_{hfs}\,|\mathrm{J}'\ m'_\mathrm{J}\rangle + \langle \mathrm{J}\ m_\mathrm{J}|\,\hat{\mathscr{H}}_{Stark}(\mathrm{J})\,|\mathrm{J}'\ m'_\mathrm{J}\rangle, \tag{3.57}$$

soit encore, utilisant l'expression de $\hat{\mathscr{H}}_{hfs}$,

$$\begin{aligned}\Delta\mathrm{E}(\mathrm{J},m_\mathrm{J};\omega) = \mathrm{A}_{hfs}\hbar m_\mathrm{J} m_\mathrm{I} + \mathrm{B}_{hfs}\hbar\frac{9(m_\mathrm{J}m_\mathrm{I})^2 - 3\mathrm{J}(\mathrm{J}+1)m_\mathrm{I}^2 - 3\mathrm{I}(\mathrm{I}+1)m_\mathrm{J}^2 + \mathrm{I}(\mathrm{I}+1)\mathrm{J}(\mathrm{J}+1)}{4\mathrm{I}(2\mathrm{I}-1)\mathrm{J}(2\mathrm{J}-1)}\\ -\frac{1}{2}\alpha^{(0)}(\mathrm{J};\omega)\,|\mathrm{E}_z|^2 - \frac{1}{2}\alpha^{(2)}(\mathrm{J};\omega)\left(\frac{3m_\mathrm{J}^2-\mathrm{J}(\mathrm{J}+1)}{\mathrm{J}(2\mathrm{J}-1)}\right)|\mathrm{E}_z|^2.\end{aligned} \tag{3.58}$$

Solution exacte (champs intermédiaires)

Dans le cas de champs intermédiaires, le déplacement énergétique des niveaux est comparable aux écarts entre les niveaux hyperfins. Par conséquent nous souhaitons déterminer les vecteurs et valeurs propres du hamiltonien suivant :

$$\hat{\mathscr{H}} = \hat{\mathscr{H}}_{hfs} + \hat{\mathscr{H}}_{Stark}(\mathrm{J}). \tag{3.59}$$

Nous cherchons ainsi à diagonaliser $\hat{\mathscr{H}}$ dans la base hyperfine $|\mathrm{F}\ m_\mathrm{F}\rangle$. Le premier terme $\hat{\mathscr{H}}_{hfs}$ est déjà diagonal dans cette base. Il nous faut ainsi calculer $\langle \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}|\,\hat{\mathscr{H}}_{Stark}(\mathrm{J})\,|\mathrm{F}'\ m'_\mathrm{F}\rangle$ [Schmieder, 1972]. Pour cela nous utilisons le fait que $(3\hat{\mathrm{J}}_z - \hat{\mathbf{J}}^2)$ est la composante $q = 0$ d'un opérateur tensoriel sphérique de rang $k = 2$ auquel nous pouvons appliquer la relation (B.17), soit

$$\langle \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}|\,(3\hat{\mathrm{J}}_z - \hat{\mathbf{J}}^2)\,|\mathrm{F}'\ m'_\mathrm{F}\rangle = \delta_{m_\mathrm{F}m'_\mathrm{F}}\,\langle \mathrm{F}||\,(3\hat{\mathrm{J}}_z - \hat{\mathbf{J}}^2)\,||\mathrm{F}'\rangle\,\langle \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}\mid \mathrm{F}'\ m_\mathrm{F}\ ;\ 2\ 0\rangle. \tag{3.60}$$

En notant que cet opérateur tensoriel n'agit que sur les états associés à $\hat{\mathbf{J}}$, nous pouvons utiliser la relation de l'élément de matrice réduit de la structure fine (B.21) en l'insérant dans (3.60) :

$$\begin{aligned}\langle \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}|\,(3\hat{\mathrm{J}}_z - \hat{\mathbf{J}}^2)\,|\mathrm{F}'\ m'_\mathrm{F}\rangle = \delta_{m_\mathrm{F}m'_\mathrm{F}}(-1)^{\mathrm{F}'+\mathrm{J}+\mathrm{I}}\sqrt{(2\mathrm{F}'+1)(2\mathrm{J}+1)}\left\{\begin{array}{ccc}\mathrm{J} & \mathrm{J}' & 2\\ \mathrm{F} & \mathrm{F}' & \mathrm{I}\end{array}\right\}\\ \times\,\langle \mathrm{J}||\,(3\hat{\mathrm{J}}_z - \hat{\mathbf{J}}^2)\,||\mathrm{J}'\rangle\,\langle \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}\mid \mathrm{F}'\ m_\mathrm{F}\ ;\ 2\ 0\rangle.\end{aligned} \tag{3.61}$$

3. Ceci est vrai seulement si $\mathbf{E} = \mathrm{E}_z\mathbf{z}$.

Nous simplifions davantage l'expression en notant, toujours d'après (B.17), que

$$\begin{aligned}\langle \mathrm{J}||\,(3\hat{\mathrm{J}}_z-\hat{\mathbf{J}}^2)\,||\mathrm{J}'\rangle\,\langle \mathrm{J}\ m_\mathrm{J}\mid \mathrm{J}'\ m'_\mathrm{J}\ ;\ 2\ 0\rangle &= \langle \mathrm{J}\ m_\mathrm{J}|\ (3\hat{\mathrm{J}}_z-\hat{\mathbf{J}}^2)\ |\mathrm{J}'\ m_\mathrm{J}\rangle \\ &= \delta_{\mathrm{JJ}'}\hbar^2\left[3m_\mathrm{J}^2-\mathrm{J}(\mathrm{J}+1)\right] \\ &= \delta_{\mathrm{JJ}'}\hbar^2\,\langle \mathrm{J}\ m_\mathrm{J}\mid \mathrm{J}\ m_\mathrm{J}\ ;\ 2\ 0\rangle\,\sqrt{\mathrm{J}(\mathrm{J}+1)(2\mathrm{J}-1)(2\mathrm{J}+3)},\end{aligned} \tag{3.62}$$

où nous avons utilisé (B.19) pour déterminer l'expression du coefficient de Clebsch-Gordan suivant :

$$\langle \mathrm{J}\ m_\mathrm{J}\mid \mathrm{J}\ m_\mathrm{J}\ ;\ 2\ 0\rangle = \frac{3m_\mathrm{J}^2-\mathrm{J}(\mathrm{J}+1)}{\sqrt{\mathrm{J}(\mathrm{J}+1)(2\mathrm{J}-1)(2\mathrm{J}+3)}}. \tag{3.63}$$

Finalement en insérant l'expression (3.62) dans (3.61), nous obtenons

$$\begin{aligned}\langle \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}|\,(3\hat{\mathrm{J}}_z-\hat{\mathbf{J}}^2)\,|\mathrm{F}'\ m'_\mathrm{F}\rangle = \delta_{m_\mathrm{F}m'_\mathrm{F}}\,(-1)^{\mathrm{F}'+\mathrm{J}+\mathrm{I}}\,\sqrt{(2\mathrm{F}'+1)(2\mathrm{J}+1)}\begin{Bmatrix}\mathrm{J} & \mathrm{J} & 2\\ \mathrm{F} & \mathrm{F}' & \mathrm{I}\end{Bmatrix} \\ \times\,\delta_{\mathrm{JJ}'}\hbar^2\sqrt{\mathrm{J}(\mathrm{J}+1)(2\mathrm{J}-1)(2\mathrm{J}+3)}\,\langle \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}\mid \mathrm{F}'\ m_\mathrm{F}\ ;\ 2\ 0\rangle\,.\end{aligned} \tag{3.64}$$

Enfin en introduisant le symbole 3-j (B.19), nous pouvons écrire

$$\langle \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}\mid \mathrm{F}'\ m_\mathrm{F}\ ;\ 2\ 0\rangle = (-1)^{\mathrm{F}'+m_\mathrm{F}}\,\sqrt{2\mathrm{F}+1}\begin{pmatrix}\mathrm{F}' & 2 & \mathrm{F}\\ m_\mathrm{F} & 0 & -m_\mathrm{F}\end{pmatrix}, \tag{3.65}$$

et donc l'élément de matrice (3.64) devient

$$\begin{aligned}\langle \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}|\,(3\hat{\mathrm{J}}_z-\hat{\mathbf{J}}^2)\,|\mathrm{F}'\ m'_\mathrm{F}\rangle = \delta_{m_\mathrm{F}m'_\mathrm{F}}\,(-1)^{\mathrm{F}'+\mathrm{J}+\mathrm{I}}\,\sqrt{(2\mathrm{F}'+1)(2\mathrm{J}+1)}\begin{Bmatrix}\mathrm{J} & \mathrm{J} & 2\\ \mathrm{F} & \mathrm{F}' & \mathrm{I}\end{Bmatrix} \\ \times\,\delta_{\mathrm{JJ}'}\hbar^2\sqrt{\mathrm{J}(\mathrm{J}+1)(2\mathrm{J}-1)(2\mathrm{J}+3)}\,(-1)^{-\mathrm{F}-m_\mathrm{F}}\,\sqrt{2\mathrm{F}+1}\begin{pmatrix}\mathrm{F} & 2 & \mathrm{F}'\\ m_\mathrm{F} & 0 & -m_\mathrm{F}\end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{3.66}$$

Finalement les éléments de matrice dans la base "hyperfine" de $\hat{\mathscr{H}}_{Stark}(\mathrm{J})$ s'écrivent

$$\begin{aligned}\langle \mathrm{F}\ m_\mathrm{F}|\,\hat{\mathscr{H}}_{Stark}(\mathrm{J})\,|\mathrm{F}'\ m'_\mathrm{F}\rangle = -\frac{1}{2}\alpha_0(\omega)\mathrm{E}^2-\frac{1}{2}\alpha_2(\omega)\mathrm{E}^2\delta_{m_\mathrm{F}m'_\mathrm{F}}\delta_{\mathrm{JJ}'}\,(-1)^{\mathrm{F}'-\mathrm{F}-m_\mathrm{F}+\mathrm{J}+\mathrm{I}}\,\sqrt{(2\mathrm{F}'+1)(2\mathrm{F}+1)} \\ \times\sqrt{\frac{(2\mathrm{J}+1)(2\mathrm{J}+2)(2\mathrm{J}+3)}{2\mathrm{J}(2\mathrm{J}-1)}}\begin{Bmatrix}\mathrm{J} & \mathrm{J} & 2\\ \mathrm{F} & \mathrm{F}' & \mathrm{I}\end{Bmatrix}\begin{pmatrix}\mathrm{F} & 2 & \mathrm{F}'\\ m_\mathrm{F} & 0 & -m_\mathrm{F}\end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{3.67}$$

En ajoutant la contribution hyperfine, le hamiltonien (3.59) peut être diagonalisé dans la base $|\mathrm{F}\ m_\mathrm{F}\rangle$ afin d'obtenir les énergies propres.

3.4 Déplacements optiques : application à l'atome de ^{87}Rb

Nous venons de voir que le champ électromagnétique interagit avec le moment dipolaire de l'atome résultant en un déplacement des énergies atomiques. A présent nous pouvons estimer les décalages de ces états en fonction de l'intensité du champ électrique polarisé linéairement pour le ^{87}Rb (I=3/2), espèce avec laquelle toutes les simulations présentées ont été effectuées. Pour cela nous présentons dans les tableaux 3.2 et 3.3 les éléments de matrice réduits du dipôle électrique pour les états $5S_{1/2}$ et $5P_{3/2}$ respectivement, utilisés pour le calcul des polarisabilités $\alpha^{(0)}$ et $\alpha^{(2)}$.

En Fig.3.16, les déplacements des états hyperfins du niveau $5P_{3/2}$ (J=3/2) sont tracés en fonction de l'intensité $\mathrm{I}=\varepsilon_0 c|\mathrm{E}_z|^2/2$ du champ électrique pour une onde plane à 1529.34 nm (celle utilisée pour la résonance plasmonique). Ces déplacements sont tracés à partir de la solution exacte donnée par (3.67). Nous indiquons également les résultats des approximations

transition	λ (en nm)	$\langle J \|\| \hat{\mathbf{d}} \|\| J' \rangle$ (en unités de ea_0)
$5S_{1/2} \rightarrow 5P_{1/2}$	794.979	4.221
$5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}$	780.241	5.965
$5S_{1/2} \rightarrow 6P_{1/2}$	421.673	0.334
$5S_{1/2} \rightarrow 6P_{3/2}$	420.299	0.541
$5S_{1/2} \rightarrow 7P_{1/2}$	359.260	0.115
$5S_{1/2} \rightarrow 7P_{3/2}$	358.807	0.202
$5S_{1/2} \rightarrow 8P_{1/2}$	335.177	0.060
$5S_{1/2} \rightarrow 8P_{3/2}$	334.966	0.111
$5S_{1/2} \rightarrow 9P_{1/2}$	323.009	0.038
$5S_{1/2} \rightarrow 9P_{3/2}$	322.891	0.073
$5S_{1/2} \rightarrow 10P_{1/2}$	315.917	0.026
$5S_{1/2} \rightarrow 10P_{3/2}$	315.844	0.053
$5S_{1/2} \rightarrow 11P_{1/2}$	311.411	0.020
$5S_{1/2} \rightarrow 11P_{3/2}$	311.362	0.040

TABLEAU 3.2 – **Elements de matrice réduits du dipôle électrique (en unités de ea_0) de l'état $5S_{1/2}$ du ^{87}Rb**, aimablement fournies par Marianna Safronova.

transition	λ (en nm)	$\langle J \|\| \hat{\mathbf{d}} \|\| J' \rangle$ (en unités de ea_0)
$5P_{3/2} \rightarrow 5S_{1/2}$	780.241	5.977
$5P_{3/2} \rightarrow 6S_{1/2}$	1366.873	6.047
$5P_{3/2} \rightarrow 7S_{1/2}$	741.021	1.350
$5P_{3/2} \rightarrow 8S_{1/2}$	616.133	0.708
$5P_{3/2} \rightarrow 9S_{1/2}$	565.531	0.468
$5P_{3/2} \rightarrow 10S_{1/2}$	539.206	0.343
$5P_{3/2} \rightarrow 4D_{3/2}$	1529.262	3.628
$5P_{3/2} \rightarrow 5D_{3/2}$	776.157	0.665
$5P_{3/2} \rightarrow 6D_{3/2}$	630.097	0.506
$5P_{3/2} \rightarrow 7D_{3/2}$	572.621	0.375
$5P_{3/2} \rightarrow 8D_{3/2}$	543.334	0.286
$5P_{3/2} \rightarrow 9D_{3/2}$	526.169	0.225
$5P_{3/2} \rightarrow 4D_{5/2}$	1529.366	10.899
$5P_{3/2} \rightarrow 5D_{5/2}$	775.979	1.983
$5P_{3/2} \rightarrow 6D_{5/2}$	630.007	1.531
$5P_{3/2} \rightarrow 7D_{5/2}$	572.571	1.104
$5P_{3/2} \rightarrow 8D_{5/2}$	543.304	0.855
$5P_{3/2} \rightarrow 9D_{5/2}$	526.149	0.672
$5P_{3/2} \rightarrow 11S_{1/2}$	523.542	0.267

TABLEAU 3.3 – **Elements de matrice réduits du dipôle électrique (en unités de ea_0) de l'état $5P_{3/2}$ du ^{87}Rb**, aimablement fournies par Marianna Safronova.

en champ faible (cercles) et en champ fort (triangles) données par les relations (3.52) et (3.58), respectivement. Dans le cas des champs forts, nous prenons le nombre quantique $m_I = 1/2$. Nous observons ainsi les trois régimes décrits précédemment : à faible intensité le hamiltonien hyperfin $\hat{\mathscr{H}}_{hfs}$ domine et la base hyperfine $|F'\ m'_F\rangle$ est bien adaptée. Les différents sous-niveaux $|F'\ |m'_F|\rangle$ sont dégénérés et varient linéairement avec l'intensité du champ. Pour des champs intermédiaires (vers 10^7 W/m^2) les niveaux hyperfins commencent à se recouper avec des décalages de l'ordre de la structure hyperfine (quelques centaines de MHz). Enfin pour de fortes intensités, le hamiltonien Stark $\hat{\mathscr{H}}_{Stark}(J)$ domine faisant de $|J'\ m'_J\rangle$ la base adaptée. Les niveaux hyperfins se séparent alors en deux groupes correspondant aux deux états $|m'_J|$ (avec $m_J = \pm 1/2, \pm 3/2$). Les décalages deviennent de l'ordre de la structure fine (quelques GHz).

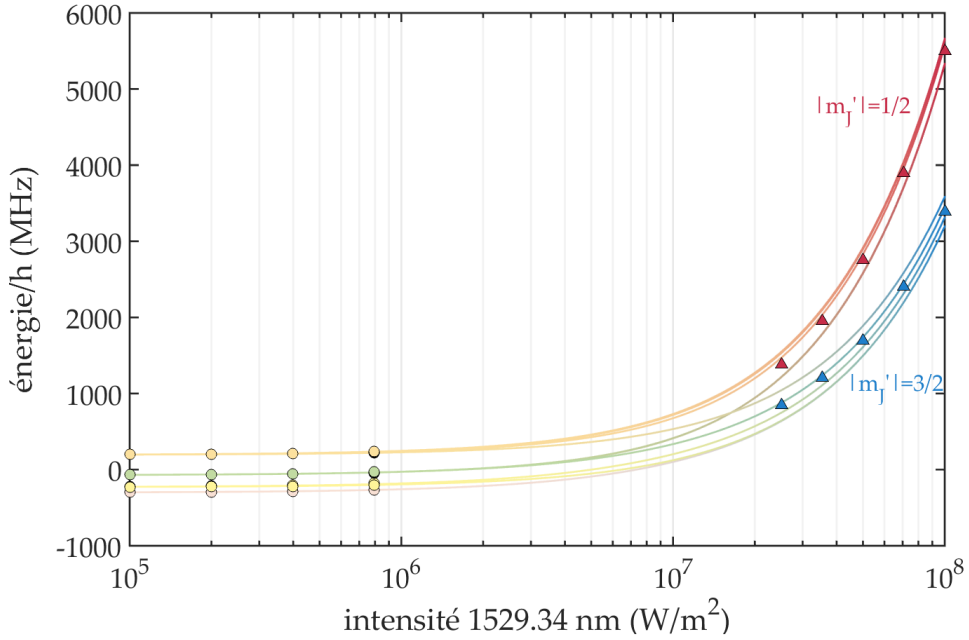


FIGURE 3.16 – **Déplacements des états hyperfins de l'état $5P_{3/2}$ du ^{87}Rb en fonction de l'intensité d'une onde plane à 1529.34 nm.** A faible intensité les niveaux hyperfins $F' = 0$ (rose), $F' = 1$ (jaune), $F' = 2$ (vert) et $F' = 3$ (orange) de l'état $5P_{3/2}$ ne sont que très peu perturbés, les sous-niveaux $|m'_F|$ sont dégénérés et évoluent linéairement avec l'intensité. Le calcul des déplacements en champ faible donnés par (3.52) (cercles) permet une bonne approximation des résultats dans cette région. Pour des intensités intermédiaires ($\sim 10^7$ W/m^2) les niveaux commencent à se croiser et leurs déplacements deviennent de l'ordre de la structure hyperfine. Lorsque l'intensité augmente, les niveaux hyperfins se regroupent dans les deux états $|m'_J| = 1/2$ (bleu) et $|m'_J| = 3/2$ (rouge) de la structure fine. Les décalages deviennent alors de l'ordre de la structure fine et se rapprochent du résultat asymptotique (3.58) calculé pour de forts champs (triangles).

Nous n'avons pas tracé le décalage des états $5S_{1/2}$ (F=1 et F=2) car ceux-ci ne sont quasiment pas affectés par le laser à cette longueur d'onde étant donné la fréquence de la transition $5S_{1/2}$ - $5P_{3/2}$ qui est de 780 nm environ (voir structure en Fig.3.1). Par exemple, pour une intensité de 10^9 W/m^2, l'état $F = 2$ subit un déplacement de seulement 1 MHz. En outre nous présentons en Fig.3.17 les résultats des deux approximations pour le calcul des déplacements, toujours pour l'état excité $5P_{3/2}$ ainsi que l'erreur commise sur le calcul pour certains niveaux.

Nous présentons également en Fig.3.18 les déplacements des états hyperfins du niveau fondamental $5S_{1/2}$ pour un laser à 780.24 nm correspondant au second laser utilisé pour la méthode (cf. Fig.3.1). Ce dernier permet de coupler les états fondamental et excité pour créer la barrière de potentiel. Les calculs dans l'approximation des faibles intensités sont également présentés et se superposent avec les résultats exacts, résultant en une erreur nulle

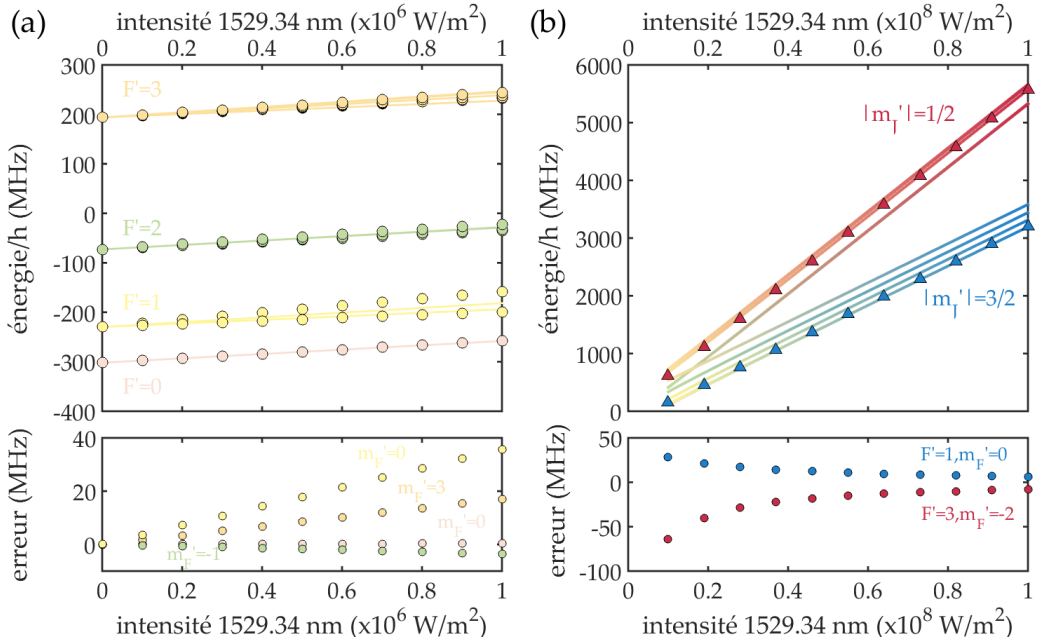


FIGURE 3.17 – **Approximations des déplacements des états hyperfins de l'état $5P_{3/2}$ en champs faibles et en champs forts à 1529.34 nm.** Les déplacements énergétiques des états hyperfins $F' = 0$ (rose), $F' = 1$ (jaune), $F' = 2$ (vert) et $F' = 3$ (orange) de l'état $5P_{3/2}$ sont présentés ainsi que les résultats dans les approximations (a) en champ faible (cercles) donnés par (3.52) et (b) en champ fort pour $\left\{m'_J, m'_I\right\} = \{3/2, -3/2\}$ (triangles bleus) et $\left\{m'_J, m'_I\right\} = \{-1/2, -3/2\}$ (triangles rouges) donnés par (3.58), ainsi que les erreurs commises pour certains sous-niveaux.

($< 10^{-12}$) dans la gamme d'intensité considérée.

Selon les intensités des lasers fixées lorsque nous calculerons les potentiels de piégeage au Chapitre 5, nous prendrons l'approximation la plus adaptée tout en nous assurant que l'erreur commise sur les déplacements énergétiques n'est pas trop élevée. En effet, les calculs de la solution exacte (pour des intensités intermédiaires) prennent plus de temps car ils nécessitent la diagonalisation du hamiltonien pour chaque valeur d'intensité (cf. relation (3.67)). Par conséquent, puisque nous allons traiter des profils spatiaux d'intensités à 2D, il est préférable de tirer profit des résultats asymptotiques (3.52) et (3.58) afin de limiter les temps de calculs.

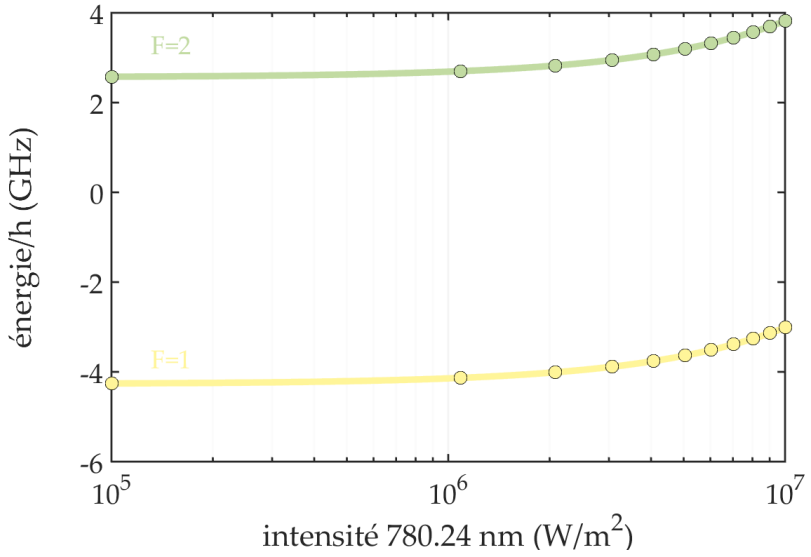


FIGURE 3.18 – **Déplacements des niveaux hyperfins de l'état $5S_{1/2}$ en fonction de l'intensité d'une onde à 780.24 nm.** Sous l'influence d'une onde plane à 780.24 nm, les niveaux hyperfins F=1 (en jaune) et F=2 (en vert) sont déplacés énergétiquement en fonction de l'intensité. L'approximation des déplacements en champ faible (cercles) sont calculés à partir de (3.52). L'erreur commise avec cette approximation est quasi-nulle dans cette configuration.

3.5 Summary

This chapter was dedicated to the optical part of our trapping method. It directly depends on the nanostructure geometry. First we presented the key ingredient of this method which is the ability of creating a spatially-decaying profile for the excited state (5P) of the ^{87}Rb. As we explained in section 3.2, this is done by using surface plasmons (SPs) properties. We saw in section 3.2.1 that they were electron oscillations at a dielectric/metal interface generated by a laser beam when the plasmonic condition is matched. To do so one must fulfill the plasmonic resonance condition by providing the missing momentum (see relation (3.15)). This can be done with an incident laser beam or grating wavevector. The trapping method we have implemented uses the evanescent mode properties of SPs. An incident laser beam around 1529 nm is sent with an angle that matches the plasmonic resonance (relation (3.18)), corresponding to the total internal reflection angle. The field generated at a silicium/gold interface couples to the SP at the gold/dielectric interface creating an evanescent electric field decaying away from the surface (see Fig.3.5).

Then in part 3.2.2 we first listed the conditions that the nanostructure must verify. We discussed about the presence of metal (required for SP generation) that could depolarize the atomic spin state. We showed that for atom positions higher than 100 nm, the metallic layer should not affect their polarization (see Fig.3.7). Moreover we noted that the spontaneous emission rate would not be modified if we insert a dielectric layer between this gold layer and the atoms. We also mentioned a fabrication technique based on metal-assisted etching that could be used for the nanostructures we have developped (see Fig.3.9). The last point we have addressed concerns the laser intensities which must not be too high so as not to damage the nanostructure. The choice of the materials was also detailed and led us to use a substrate of silicon, a thin layer of gold and a layer of glass (SiO_2).

With these prerequisites in mind, we optimized the geometry for both planar and structured surfaces. These optimizations were based on maximizing the gradient of 1529nm-laser intensity close to the interface dielectric/vacuum. The scans of surface dimensions (layers' heights and plasmonic angle) led us to fix a 41nm gold layer and a SiO_2 layer of 158 nm for the planar surface (see Fig.3.11). Concerning the one-dimensionnal structure it is composed

of a glass grating whose period was fixed at 100 nm. We followed the same optimization as the planar one (plus the scans for the grating dimensions) and it gave us a thin Au layer of 10 nm, a grating with a height of 500 nm and a width of 25 nm (see Fig.3.13). Furthermore in this 1D configuration we added a second laser at 1529 nm (opposite direction to the first) in order to also create a spatially-decaying intensity profile between two ridges (see Fig.3.15).

In section 3.3, we detailed the calculations of the energy shifts due to the interaction between an electric field and atomic dipole moment. First we expressed the atomic polarizability α which is given by (3.32) for the ground state (5S). In part 3.3.3 we present the results in three intensity regimes : weak, strong and intermediate. Depending on the value of the laser intensities we will use the right approximation to calculate atomic level shifts. Finally in the last part (3.4) we applied these previous results to calculate the energy shifts of the 5S and 5P states of ^{87}Rb to compare the different approximations.

Références

Angel, J. R. P. and Sandars, P. G. H. (1968). The Hyperfine Structure Stark Effect. I. Theory. 112

Arimondo, E., Inguscio, M., and Violino, P. (1977). Experimental determinations of the hyperfine structure in the alkali atoms. *Reviews of Modern Physics*, 49(1) :31–75. 110

Ashcroft, N. W. and Mermin, N. D. (1976). *Solid state physics*. Holt, Rinehart and Winston. 94

Barnes, W. L. (2006). Surface plasmon–polariton length scales : a route to sub-wavelength optics. *J. Opt. A : Pure Appl. Opt.*, 8. 95

Barnes, W. L., Dereux, A., and Ebbesen, T. W. (2003). Surface plasmon subwavelength optics. *Nature*, 424(6950) :824–830. 98

Boarino, L., Imbraguglio, D., Enrico, E., De Leo, N., Celegato, F., Tiberto, P., Pugno, N., and Amato, G. (2011). Fabrication of ordered silicon nanopillars and nanowires by self-assembly and metal-assisted etching. *physica status solidi (a)*, 208(6) :1412–1416. 102

Buhmann, S. Y., Knöll, L., Welsch, D.-G., and Dung, H. T. (2004). Casimir-Polder forces : A nonperturbative approach. *Physical Review A*, 70(5) :052117. 101

Buhmann, S. Y. and Welsch, D.-G. (2007). Dispersion forces in macroscopic quantum electrodynamics. *Progress in Quantum Electronics*, 31(2) :51–130. 101

Busquet, C. (2017). *Développement d'un système d'imagerie superrésolue d'un gaz d'atomes ultrafroids piégés dans des réseaux*. PhD thesis, Université de Bordeaux. 99

Ditlbacher, H., Krenn, J. R., Schider, G., Leitner, A., and Aussenegg, F. R. (2002). Two-dimensional optics with surface plasmon polaritons. *Applied Physics Letters*, 81(10) :1762–1764. 98

D'Ortenzi, L., Monsù, R., Cara, E., Fretto, M., Kara, S., Rezvani, S. J., and Boarino, L. (2016). Electrical Contacts on Silicon Nanowires Produced by Metal-Assisted Etching : a Comparative Approach. *Nanoscale Research Letters*, 11(1) :468. 102, 103

Ebbesen, T. W., Lezec, H. J., Ghaemi, H. F., Thio, T., and Wolff, P. A. (1998). Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. *Nature*, 391(6668) :667–669. 98

Fano, U. (1941). The Theory of Anomalous Diffraction Gratings and of Quasi-Stationary Waves on Metallic Surfaces (Sommerfeld's Waves). *Journal of the Optical Society of America*, 31(3) :213. 93

Han, H., Huang, Z., and Lee, W. (2014). Metal-assisted chemical etching of silicon and nanotechnology applications. *Nano Today*, 9(3) :271–304. 102

Homola, J. (2003). Present and future of surface plasmon resonance biosensors. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 377(3) :528–539. 98

Hugonin, J.-P. and Lalanne, P. (2005). *Reticolo software for grating analysis, textdisponible sur https ://www.lp2n.institutoptique.fr/Membres-Services/Responsables-d-equipe/LALANNE-Philippe*. Institut d'Optique, Palaiseau. 97, 98, 104

Jackson, J. D. (1975). *Classical electrodynamics*. Wiley. 93, 99

Johnson, J. B. (1928). Thermal Agitation of Electricity in Conductors. *Physical Review*, 32(1) :97–109. 99

Johnson, P. B. and Christy, R. W. (1972). Optical Constants of the Noble Metals. *Physical Review B*, 6(12) :4370–4379. 94

Jones, M. P. A., Vale, C. J., Sahagun, D., Hall, B. V., and Hinds, E. A. (2003). Spin Coupling between Cold Atoms and the Thermal Fluctuations of a Metal Surface. *Physical Review Letters*, 91(8) :080401. 99

Khadjavi, A., Lurio, A., and Happer, W. (1968). Stark Effect in the Excited States of Rb, Cs, Cd, and Hg. *Physical Review*, 167(1) :128–135. 112

Kik, P. G. and Brongersma, M. L. (2007). *Surface Plasmon Nanophotonics*. Springer, Dordrecht. 98

Kretschmann, E. and Raether, H. (1968). Notizen : Radiative Decay of Non Radiative Surface Plasmons Excited by Light. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 23(12) :2135–2136. 97

Nyquist, H. (1928). Thermal Agitation of Electric Charge in Conductors. *Physical Review*, 32(1) :110–113. 99

Otto, A. (1968). Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei*, 216(4) :398–410. 98

Palik, E. D. (1998). *Handbook of optical constants of solids*. Academic Press. 98, 104

Palmer, C. and Loewen, E. (2005). *Diffraction Grating Handbook*. Newport Corporation. 93

Pendry, J., Holden, A., Robbins, D., and Stewart, W. (1999). Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 47(11) :2075–2084. 93

Pines, D. (1956). Collective Energy Losses in Solids. *Reviews of Modern Physics*, 28(3) :184–198. 93

Porsev, S. G., Rakhlina, Y. G., and Kozlov, M. G. (1999). Electric-dipole amplitudes, lifetimes, and polarizabilities of the low-lying levels of atomic ytterbium. *Physical Review A*, 60(4) :2781–2785. 114

Raether, H. (1988). *Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings*. Springer. 94, 97, 98

Ready, J. F. (1971). *Effects of high-power laser radiation*. Academic Press. 102

Rekdal, P. K., Scheel, S., Knight, P. L., and Hinds, E. A. (2004). Thermal spin flips in atom chips. *Physical Review A*, 70. 100

Sarid, D. and Challener, W. A. (2010). *Modern introduction to surface plasmons : theory, Mathematica modeling, and applications*. Cambridge University Press. 98, 104, 108

Scheel, S., Rekdal, P. K., Knight, P. L., and Hinds, E. A. (2005). Atomic spin decoherence near conducting and superconducting films. *Physical Review A*, 72. 100

Schmieder, R. W. (1972). Matrix Elements of the Quadratic Stark Effect on Atoms with Hyperfine Structure. *American Journal of Physics*, 40(2) :297–311. 112, 114

Specht, M., Pedarnig, J. D., Heckl, W. M., and Hänsch, T. W. (1992). Scanning plasmon near-field microscope. *Physical Review Letters*, 68(4) :476–479. 98

Stark, J. (1914). Beobachtungen über den Effekt des elektrischen Feldes auf Spektrallinien. I. Quereffekt. *Annalen der Physik*, 348(7) :965–982. 110

Steck, D. A. (2001). Rubidium 87 D Line Data, available at *http ://www.steck.us/alkalidata/*. 110

Steck, D. A. (2007). Quantum and Atom Optics, available at *http ://atomoptics-nas.uoregon.edu/ dsteck/teaching/*. 112

Volkert, C. A. and Minor, A. M. (2007). Focused Ion Beam Microscopy and Micromachining. *MRS Bulletin*, 32(05) :389–399. 102

Weber, M. J. (2003). *Handbook of optical materials*. CRC Press. 100, 102

Wood, R. W. (1902). On a Remarkable Case of Uneven Distribution of Light in a Diffraction Grating Spectrum. *Proceedings of the Physical Society of London*, 18(1) :269–275. 93

Wood, R. W. (1935). Anomalous Diffraction Gratings. *Physical Review*, 48(12) :928–936. 93

Chapitre 4

Interaction entre un atome et une nanostructure induite par les fluctuations quantiques : effet Casimir-Polder

« *L'imagination est plus importante que le savoir.* »

Albert Einstein

Sommaire

4.1 Des forces de van der Waals à Casimir 124
4.1.1 Interaction atome-atome 124
4.1.2 Interaction atome-corps macroscopique 124
4.1.3 Interaction entre deux corps macroscopiques 125
4.2 Potentiel d'interaction atome-surface : couplage multipolaire 126
4.2.1 Éléments de QED 127
4.2.2 Interaction entre une nanostructure et un atome 129
4.2.3 Techniques d'intégration dans le plan complexe 131
4.2.4 Potentiels énergétiques en terme de polarisabilité atomique 133
4.2.5 Polarisabilité et permittivité en fréquences imaginaires 133
4.2.6 Contribution thermique 134
4.3 Interaction atome-surface 136
4.3.1 Surface plane et stratifiée 136
4.3.2 Surface nanostructurée à une dimension 141
4.4 Conclusion et perspectives 161
4.5 Summary 162

A proximité d'une nanostructure, les états énergétiques d'un atome sont modifiés en raison des fluctuations quantiques du vide. Dans ce chapitre nous expliquerons l'origine de cette interaction ainsi que les conséquences sur le piégeage d'atomes en champ proche de surfaces structurées. Pour cela, après un bref tour d'horizon historique des différentes interactions et des méthodes de calculs correspondantes, nous présenterons le calcul qui permet d'obtenir le potentiel exact d'interaction entre un atome dans un état quelconque n et un objet macroscopique à température nulle. Enfin nous appliquerons ces résultats pour calculer l'énergie d'interaction entre un atome de ^{87}Rb dans les états fondamental et excité et les nanostructures optimisées dans le chapitre précédent.

4.1 Des forces de van der Waals à Casimir

A la fin du XIXème siècle, Johannes D. van der Waals a montré l'existence de forces d'interaction à longue portée entre deux constituants électriquement neutres (atomes, molécules, ...) séparés d'une distance plus importante que l'échelle atomique. Ces travaux ont ensuite été repris dans le cas d'une interaction entre un atome et un corps macroscopique ou entre deux corps macroscopiques. Nous résumons ici les résultats généraux. Pour plus de détails le lecteur pourra par exemple se référer à l'ouvrage [Buhmann, 2012a].

4.1.1 Interaction atome-atome

Les fluctuations de charges électriques au sein de deux atomes non-polarisables engendrent des dipôles induits dont le signe de l'interaction dépend de l'orientation de chacun. Au premier ordre, lorsque l'on moyenne sur toutes les orientations possibles, les contributions attractives et répulsives s'annulent pour donner une énergie d'interaction nulle. Cependant, dans le cadre de la théorie des perturbations indépendantes du temps, Fritz London a montré que le décalage en énergie au second ordre dû à l'interaction dipôle-dipôle entre deux atomes dans leur état fondamental séparés d'une distance r était de la forme $U(r) \propto -C_6/r^6$ [London, 1937], C_6 étant une constante traduisant l'intensité de l'interaction répulsive. Ce potentiel est ainsi connu sous le nom de potentiel de van der Waals (vdW) ou de London.

Les méthodes électrostatiques sont capables de décrire l'interaction à courtes distances ($r < \lambda_0$, où λ_0 est la longueur d'onde caractéristique de l'atome). Pour des distances interatomiques plus importantes il est nécessaire d'utiliser l'ElectroDynamique Quantique (QED pour *Quantum ElectroDynamics* en anglais) prenant à la fois en compte les fluctuations de charges des atomes mais également les fluctuations de champs électromagnétiques. Les atomes interagissent alors indirectement, en se couplant aux modes transverses du champ qui se trouve dans son état fondamental. Avec cette méthode de calcul, Hendrik B.G. Casimir et Dirk Polder ont généralisé cette interaction pour une distance de séparation quelconque [Casimir and Polder, 1948]. En particulier ils ont montré que le potentiel de London correspondait à la valeur asymptotique du potentiel lorsque la distance interatomique devenait inférieure aux longueurs d'ondes atomiques caractéristiques. Dans le cas où la distance r est plus grande que ces dernières, le potentiel évolue alors en $1/r^7$. Ces deux régimes sont communément appelés régime **non-retardé** (cas où $r < \lambda_0$) qui correspond à prendre une vitesse de la lumière infinie (interaction instantanée) et régime **retardé** ($r > \lambda_0$) qui prend en compte la vraie valeur finie de la vitesse de la lumière.

Ces forces d'interaction entre deux atomes sont nommées **forces de van der Waals**.

4.1.2 Interaction atome-corps macroscopique

On considère ici les forces qui agissent entre un atome dans son état fondamental et un corps macroscopique, à température nulle. Identiquement au cas précédent où l'on considérait l'interaction entre deux atomes, les fluctuations quantiques (charges+champs) vont engendrer une force attractive entre les deux objets.

Ainsi, de la même manière que pour l'interaction vdW on peut utiliser une approche électrostatique pour calculer cette interaction. Le dipôle atomique va interagir avec son image créée par la surface. En revanche, l'orientation des dipôles n'est ici pas indépendante, ainsi en moyennant sur les possibles orientations du dipôle électrique $\hat{\mathbf{d}}$, on obtient une énergie d'interaction non-nulle donnée par [Lennard-Jones, 1932]

$$U(r) = -\frac{\langle \hat{\mathbf{d}} \rangle}{48\pi\epsilon_0 r^3}. \tag{4.1}$$

Comme pour le cas précédent cette relation est valable dans le régime non-retardé ($r < \lambda_0$). Pour des distances de séparation r supérieures à λ_0 (régime retardé), [Casimir and Polder, 1948] ont montré que le potentiel était donné par

$$U(r) = -\frac{3\hbar c \alpha_A}{32\pi^2 \epsilon_0 r^4}, \tag{4.2}$$

où α_A est la polarisabilité atomique.

Une autre méthode de calcul pour cette interaction, notamment dans le cas d'un corps macroscopique de forme arbitraire, est de considérer le milieu macroscopique non plus comme un milieu qui répond de manière homogène à un champ électromagnétique mais plutôt comme un milieu réel, *i.e.*, en prenant en compte les propriétés dissipatives du matériau. C'est la théorie de la réponse linéaire [McLachlan, 1963]. Les fluctuations de charges vont créer des champs qui vont à leur tour agir sur les charges qui composent l'autre objet, et réciproquement les fluctuations de champ entre les deux objets vont agir sur les charges composant les deux objets. Ces forces de dispersion dépendent directement des fluctuations qui peuvent être reliées aux fonctions de réponse *via* le théorème fluctuation-dissipation [Landau and Lifshitz, 1980]. Les fluctuations du dipôle atomique sont décrites par la polarisabilité atomique $\alpha_n(\omega)$ d'un atome dans l'état n et les fluctuations de champs par le tenseur de Green $\mathbf{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)$ - ce tenseur définit la propagation d'un champ électrique de $\mathbf{r}_2$ jusqu'à la position $\mathbf{r}_1$ créé par l'oscillation d'un dipôle à la fréquence ω. On montre alors que le potentiel énergétique de l'atome dans son état fondamental ($n = 0$) est donné, à l'équilibre, par [Dzyaloshinskii et al., 1961; McLachlan, 1963]

$$U(\mathbf{r}) = \frac{\hbar \mu_0}{2\pi} \int_0^\infty d\xi \xi^2 \alpha_0(i\xi) \mathrm{Tr}\, \mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, i\xi), \tag{4.3}$$

où l'intégration porte sur les fréquences imaginaires : $\omega = i\xi$ (nous aborderons ce point dans la partie suivante). Ce résultat est valable pour n'importe quelle distance r.

Ces forces d'interaction entre un atome et un corps macroscopique sont nommées **forces de Casimir-Polder**.

4.1.3 Interaction entre deux corps macroscopiques

A présent, nous considérons deux objets macroscopiques interagissant l'un avec l'autre, à température nulle.

Hugo C. Hamaker et Jan H. de Boer ont affirmé que les fluctuations de charges étaient responsables de la force attractive entre les deux corps [de Boer, 1936; Hamaker, 1937]. Cette force est alors donnée, dans le cas de deux milieux diélectriques semi-infinis séparés d'une distance r, par l'expression suivante [de Boer, 1936] :

$$\mathbf{f} = -\frac{A}{12\pi r^3} \mathbf{e}_r, \tag{4.4}$$

où l'on a introduit la constante de Hamaker $A = \pi^2 n_1 n_2 C_6$, avec les densités atomiques n_1 et n_2 des deux milieux. Cette force (4.4) correspond alors à un potentiel en $-1/r^2$.

A l'inverse, H. Casimir a calculé la force d'attraction entre deux plaques métalliques parfaitement conductrices à partir des fluctuations de champs, *via* une approche QED [Casimir, 1948]. Il trouva alors une expression de la forme :

$$\mathbf{f} = -\frac{\pi^2 \hbar c}{240 r^4} \mathbf{e}_r, \tag{4.5}$$

correspondant à un potentiel d'interaction de la forme $U(r) \propto -1/r^3$.

Ces deux expressions (4.4) et (4.5) sont valables dans les régimes non-retardé et retardé, respectivement. En 1956, Evgeny M. Lifshitz proposa une théorie basée sur la théorie de la réponse linéaire [Lifshitz, 1956]. Il considéra deux milieux diélectriques dans lequel les fluctuations de charges génèrent des fluctuations de champ électromagnétique et détermina la force moyenne de ces dernières sur la seconde plaque diélectrique. Pour cela il utilisa le théorème de fluctuation-dissipation (mentionné ci-dessus) pour relier la force des fluctuations avec la permittivité diélectrique du matériau. Les deux résultats précédents (4.4) et (4.5) sont alors les résultats asymptotiques de son calcul lorsqu'il prend deux milieux diélectriques faiblement interagissant à courtes distances ($r << \lambda_0$) et le cas d'une permittivité infinie (≡ métal parfait), respectivement.

Ces forces d'interaction entre deux corps macroscopiques sont généralement nommées **forces de Casimir**.

Ces trois configurations sont résumées en Fig.4.1, où les méthodes de calcul associées sont résumées selon le régime de distance dans lequel nous nous trouvons.

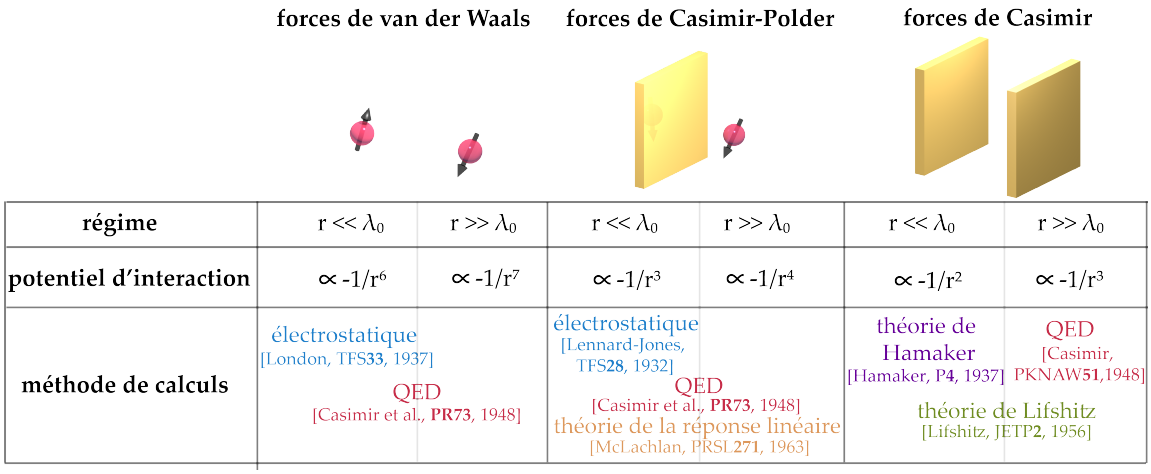


FIGURE 4.1 – **Potentiels d'interaction dans différentes configurations et méthodes de calcul associées.** Les forces de van der Waals (vdW), de Casimir-Polder (CP) et de Casimir sont associées aux interactions atome-atome, atome-objet macroscopique et entre deux objets macroscopiques, respectivement. Les potentiels d'interaction suivent différentes lois de puissances en fonction de la distance de séparation r selon si l'atome est dans le régime non-retardé ($r << \lambda_0$) ou retardé ($r >> \lambda_0$). Différentes méthodes de calculs permettent de déterminer les énergies d'interaction dont les références sont indiquées dans le texte.

4.2 Potentiel d'interaction atome-surface : couplage multipolaire

Comme nous venons de le voir, pour un atome interagissant avec un corps macroscopique, les méthodes principales de calculs des déplacements d'énergie par les fluctuations quantiques du vide sont la QED et la théorie de la réponse linéaire. Dans la première approche, les propriétés de dispersion et d'absorption des matériaux sont souvent ignorées car cette méthode traite les milieux macroscopiquement, négligeant la dépendance spectrale de leur réponse optique. Dans la seconde approche, le champ électromagnétique n'est pas quantifié. Cette méthode tire profit du théorème de fluctuation-dissipation, utilisable seulement pour des systèmes à l'équilibre. Ainsi si l'on souhaite tenir compte de la dynamique interne de l'atome (e.g., si l'atome est excité) cette méthode ne serait pas applicable. Dans ce qui suit nous suivons une méthode perturbative, détaillée dans [Buhmann et al., 2004], qui combine les avantages des deux approches citées précédemment. De plus les ré-

sultats sont utilisables pour de nombreuses configurations (atome-atome, forme arbitraire de diélectrique, etc...).

Il y a deux manières de décrire l'interaction entre un champ électromagnétique et une particule chargée : l'une avec le hamiltonien de couplage minimal et l'autre avec le hamiltonien multipolaire [Perina, 2001]. Ces deux hamiltoniens sont reliés par une transformation unitaire. Le second hamiltonien prend une forme simple sans le terme d'interaction coulombienne statique et peut décrire de manière exacte les effets de retard par l'échange de photons transverses, *i.e.*, les photons avec une composante de polarisation perpendiculaire au vecteur d'onde $\mathbf{k}$. C'est cette approche que nous utiliserons pour décrire l'interaction CP entre un atome et un corps macroscopique. De plus nous utilisons ici une approche statique, ce qui signifie que nous négligeons la dynamique interne de l'atome. Avant cela, rappelons brièvement quelques éléments de QED afin d'introduire la notion de tenseur de Green qui nous sera utile pour la suite.

4.2.1 Éléments de QED

Nous notons $\hat{\mathbf{E}}$ et $\hat{\mathbf{H}}$ les opérateurs champs électrique et magnétique respectivement, tandis que $\hat{\mathbf{D}}$ et $\hat{\mathbf{B}}$ sont les opérateurs densités de flux électrique et magnétique respectivement. Dans un milieu dispersif et absorbant de permittivité ϵ et de perméabilité μ, les relations constitutives sont données par [Jackson, 1975]

$$\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r},t) = \epsilon_0\epsilon\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r},t) + \hat{\mathbf{P}}_\mathrm{N}(\mathbf{r},t), \tag{4.6a}$$

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r},t) = \mu_0\mu\left(\hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r},t) + \hat{\mathbf{M}}_\mathrm{N}(\mathbf{r},t)\right), \tag{4.6b}$$

avec ϵ_0 et μ_0 les permittivité et perméabilité du vide respectivement. Les termes $\hat{\mathbf{P}}_\mathrm{N}$ et $\hat{\mathbf{M}}_\mathrm{N}$ décrivent la polarisation et la magnétisation du bruit, respectivement.

Les équations de Maxwell en l'absence de charges et de courants, dans le domaine fréquentiel, prennent la forme suivante :

$$\nabla\cdot\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r},\omega) = 0, \tag{4.7a}$$

$$\nabla\cdot\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r},\omega) = 0, \tag{4.7b}$$

$$\nabla\times\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r},\omega) = i\omega\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r},\omega), \tag{4.7c}$$

$$\nabla\times\hat{\mathbf{H}}(\mathbf{r},\omega) = -i\omega\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{r},\omega), \tag{4.7d}$$

où nous posons les composantes des champs telles que

$$\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{r}) = \int_0^\infty d\omega\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{r},\omega) + \mathrm{h.c.}. \tag{4.8}$$

Afin d'alléger les notations nous notons $\hat{\mathbf{f}} \equiv \hat{\mathbf{f}}(\mathbf{r},\omega)$. En insérant les relations (4.6a) et (4.6b) dans (4.7d), nous obtenons

$$\nabla\times\left(\frac{1}{\mu_0\mu}\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{M}}_\mathrm{N}\right) + i\omega\left(\epsilon_0\epsilon\hat{\mathbf{E}} + \hat{\mathbf{P}}_\mathrm{N}\right) = 0. \tag{4.9}$$

En utilisant maintenant l'équation de Maxwell-Faraday (4.7c) nous réécrivons (4.9) sous la forme

$$\left[\nabla\times\frac{1}{\mu}\nabla\times - \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon\right]\hat{\mathbf{E}} = i\omega\mu_0\hat{\mathbf{j}}_\mathrm{N}, \tag{4.10}$$

où

$$\hat{\mathbf{j}}_\mathrm{N} = -i\omega\hat{\mathbf{P}}_\mathrm{N} + \nabla\times\hat{\mathbf{M}}_\mathrm{N} \tag{4.11}$$

est la densité de courant du bruit. En appliquant l'opérateur divergence sur la relation (4.11), nous obtenons l'équation de continuité suivante :

$$-i\omega\hat{\rho}_\mathrm{N} + \nabla\cdot\hat{\mathbf{j}}_\mathrm{N} = 0, \tag{4.12}$$

avec $\hat{\rho}_N = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{P}}_N$ la densité de charge du bruit.

Nous introduisons maintenant la notion de tenseur de Green classique $\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ comme solution de l'équation d'onde (4.10), soit

$$\left[\nabla \times \frac{1}{\mu}\nabla \times -\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon\right]\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{4.13}$$

Nous définissons ici la composante $G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ du tenseur (où $\alpha, \beta = x, y, z$) comme la solution $E_\alpha(\mathbf{r})$ dont la source de courant localisée est : $i\omega\mu_0 \hat{j}_{N,\mu} \rightarrow \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta_{\mu\beta}$. Par ailleurs, on montre avec le théorème de Gauss que la fonction de distribution de Dirac à 3 dimensions est donnée par

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi}\Delta\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\mathbf{I}, \tag{4.14}$$

où $\mathbf{I}$ est le tenseur unitaire.

A partir des équations d'onde (4.10) et (4.13) nous en déduisons l'expression du champ électrique en fonction du tenseur de Green classique :

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = i\mu_0\omega \int d^3r' \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \hat{\mathbf{j}}_N(\mathbf{r}', \omega). \tag{4.15}$$

A présent nous notons les opérateurs bosoniques création et annihilation d'excitations collectives $\hat{f}^\dagger_\lambda(\mathbf{r}, \omega)$ et $\hat{f}_\lambda(\mathbf{r}, \omega)$ respectivement, où λ est associé à la polarisation ($\lambda = e$) ou la magnétisation ($\lambda = m$) du milieu. Ces opérateurs sont associés aux excitations collectives du système {corps macroscopique+champ}, en d'autres termes aux propriétés d'absorption et de dispersion du milieu. Nous rappelons les relations de commutation que doivent respecter ces opérateurs :

$$\left[\hat{\mathbf{f}}_\lambda(\mathbf{r}, \omega), \hat{\mathbf{f}}^\dagger_{\lambda'}(\mathbf{r}', \omega')\right] = \delta_{\lambda\lambda'}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(\omega - \omega'), \tag{4.16}$$

$$\left[\hat{\mathbf{f}}_\lambda(\mathbf{r}, \omega), \hat{\mathbf{f}}_{\lambda'}(\mathbf{r}', \omega')\right] = \left[\hat{\mathbf{f}}^\dagger_\lambda(\mathbf{r}, \omega), \hat{\mathbf{f}}^\dagger_{\lambda'}(\mathbf{r}', \omega')\right] = \mathbf{0}. \tag{4.17}$$

Par ailleurs, d'après le théorème de fluctuation-dissipation, la polarisation et la magnétisation du bruit sont associées aux parties imaginaires de la permittivité et de la perméabilité, respectivement [1]. Ainsi elles s'expriment en fonction des opérateurs bosoniques de la manière suivante [Perina, 2001] :

$$\hat{\mathbf{P}}_N = i\sqrt{\frac{\hbar\epsilon_0}{\pi}\mathrm{Im}\epsilon}\,\hat{\mathbf{f}}_e, \tag{4.18}$$

$$\hat{\mathbf{M}}_N = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi\mu_0}\frac{\mathrm{Im}\mu}{|\mu|^2}}\,\hat{\mathbf{f}}_m. \tag{4.19}$$

Nous rappelons que $\epsilon, \mu \equiv \epsilon(\mathbf{r}, \omega), \mu(\mathbf{r}, \omega)$.

Avec ces expressions nous pouvons réécrire la densité de courant du bruit (4.11) sous la forme

$$\hat{\mathbf{j}}_N = \omega\sqrt{\frac{\hbar\epsilon_0}{\pi}\mathrm{Im}\epsilon}\,\hat{\mathbf{f}}_e + \nabla \times \sqrt{\frac{\hbar}{\pi\mu_0}\frac{\mathrm{Im}\mu}{|\mu|^2}}\,\hat{\mathbf{f}}_m. \tag{4.20}$$

En insérant (4.20) dans (4.15) le champ électrique devient

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) = \sum_{\lambda=e,m}\int d^3r' \mathbf{G}_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \hat{\mathbf{f}}_\lambda(\mathbf{r}', \omega), \tag{4.21}$$

1. Pour la polarisation, ce théorème s'exprime ici [Buhmann, 2012a] : $\langle \Delta\hat{\mathbf{P}}_N \Delta\hat{\mathbf{P}}^\dagger_N + \Delta\hat{\mathbf{P}}^\dagger_N \Delta\hat{\mathbf{P}}_N \rangle_{cl} = \hbar\epsilon_0/\pi \mathrm{Im}\epsilon\,(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\,\delta(\omega - \omega')$, où $\Delta f = f - \langle f \rangle_{cl}$ correspond aux fluctuations classiques.

avec

$$\mathbf{G}_e(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) = i\frac{\omega^2}{c^2}\sqrt{\frac{\hbar}{\pi\epsilon_0}\mathrm{Im}\epsilon(\mathbf{r}',\omega)}\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega), \tag{4.22}$$

$$\mathbf{G}_m(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) = i\frac{\omega}{c}\sqrt{\frac{\hbar}{\pi\epsilon_0}\frac{\mathrm{Im}\mu(\mathbf{r}',\omega)}{|\mu(\mathbf{r}',\omega)|^2}}\left[\nabla'\times\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega)\right]^{\mathrm{T}}. \tag{4.23}$$

Nous notons également que ces deux relations respectent l'égalité suivante [Buhmann, 2012a] :

$$\sum_\lambda \int d^3u\,\mathbf{G}_\lambda(\mathbf{r},\mathbf{u},\omega)\cdot\mathbf{G}^{*,\mathrm{T}}_\lambda(\mathbf{r}',\mathbf{u},\omega) = \frac{\hbar\mu_0}{\pi}\omega^2\mathrm{Im}\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega). \tag{4.24}$$

D'après (4.8) et (4.21) nous pouvons finalement exprimer le champ électrique $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r})$ sous la forme :

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = \int_0^\infty d\omega\sum_\lambda\int d^3r'\mathbf{G}_\lambda(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega)\cdot\hat{\mathbf{f}}_\lambda(\mathbf{r}',\omega) + \mathrm{h.c.}. \tag{4.25}$$

Maintenant que nous avons posé ces définitions et exprimé le champ électrique dans le formalisme de la QED, étudions l'interaction entre ce champ et le dipôle atomique.

4.2.2 Interaction entre une nanostructure et un atome

Nous cherchons à calculer l'interaction d'un atome dans un état quelconque $|n\rangle$ avec la nanostructure, pour cela nous nous plaçons dans l'approche de couplage multipolaire. Le hamiltonien de l'atome est donné par (3.27), soit en considérant l'atome au repos :

$$\hat{\mathscr{H}}_\mathrm{A} = \sum_\beta \mathrm{E}_\beta|\beta\rangle\langle\beta|, \tag{4.26}$$

où E_β correspond à l'énergie associé à l'état $|\beta\rangle$.

Dans le cadre de la théorique quantique des champs, le hamiltonien du champ électromagnétique s'écrit [Dung et al., 2003]

$$\hat{\mathscr{H}}_\mathrm{F} = \sum_{\lambda=e,m}\int d^3r\int_0^\infty d\omega\hbar\omega\hat{f}^\dagger_\lambda(\mathbf{r},\omega)\hat{f}_\lambda(\mathbf{r},\omega). \tag{4.27}$$

Nous pouvons définir le hamiltonien non-couplé de l'atome et du champ tel que

$$\hat{\mathscr{H}}_0 = \hat{\mathscr{H}}_\mathrm{A} + \hat{\mathscr{H}}_\mathrm{F}. \tag{4.28}$$

Nous notons $|\beta\ n_\lambda\rangle$ et $\mathrm{E}_{\beta,n_\lambda} = \mathrm{E}_\beta + n_\lambda\hbar\omega$ les états et énergies propres respectifs qui lui sont associés, où β définit l'état de l'atome et n_λ le nombre de photons avec une énergie $\hbar\omega$ dans le champ électromagnétique.

Nous tenons maintenant compte de l'interaction entre l'atome positionné en $\mathbf{r}_\mathrm{A}$ et le champ, en nous plaçant dans l'approximation des grandes longueurs d'ondes et en négligeant les interactions magnétiques. Ainsi nous avons vu au chapitre précédent (cf. relation (3.29)) qu'elle était caractérisée par un hamiltonien d'interaction dipolaire-électrique donné par

$$\hat{\mathscr{H}}_\mathrm{AF} = -\hat{\mathbf{d}}\cdot\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_\mathrm{A}), \tag{4.29}$$

où l'opérateur dipôle électrique est défini par (3.30) avec $g \equiv n$ et $e \equiv k$.

Après avoir introduit ces notations, intéressons-nous au décalage en énergie des niveaux d'un atome dans le vide en présence d'un corps macroscopique. Nous rappelons que ce décalage est dû aux fluctuations quantiques du vide [2], lorsque le champ électromagnétique

2. Nous négligeons pour le moment les fluctuations thermiques, nous verrons plus loin les raisons de cette hypothèse.

est dans l'état $|0_\lambda\rangle$. Pour ce calcul nous allons utiliser la théorie des perturbations au second ordre, indépendante du temps. Le décalage en énergie de l'atome est ainsi donné par

$$\Delta E_n = \langle 0_\lambda\ n|\hat{\mathscr{H}}_0|n\ 0_\lambda\rangle + \langle 0_\lambda\ n|\hat{\mathscr{H}}_{AF}|n\ 0_\lambda\rangle + \sum_\Phi \frac{\left|\langle 0_\lambda\ n|\hat{\mathscr{H}}_{AF}|\Phi\rangle\right|^2}{E_{n,0} - E_{k,1_\lambda}}, \tag{4.30}$$

où nous notons $|\Phi\rangle = |k\ 1_\lambda\rangle \equiv |k\ 1_\lambda(\mathbf{r},\omega)\rangle$ les états intermédiaires. Cela signifie que l'atome interagit dans un premier temps avec le champ en passant dans un état d'énergie supérieure tout en émettant un photon, c'est le processus décrit par le terme $\langle 0_\lambda\ n|\hat{\mathscr{H}}_{AF}|k\ 1_\lambda\rangle$ dans la relation (4.30). Puis dans un second temps, le terme $\langle 1_\lambda\ k|\hat{\mathscr{H}}_{AF}|n\ 0_\lambda\rangle$ décrit le processus inverse où l'atome passe dans un niveau d'énergie inférieure en absorbant un photon. Cela montre bien que nous avons affaire ici à des photons virtuels, le principe de conservation d'énergie étant violé le cas échéant. Les deux premiers termes de (4.30) sont nuls, ainsi en notant que $E_{n,0} - E_{k,1_\lambda} = E_n - (E_k + \hbar\omega) = -\hbar(\omega_{kn} + \omega)$, où nous posons $\hbar\omega_{kn} = E_k - E_n$, le potentiel énergétique de Casimir-Polder (CP) pour l'état n s'écrit [Buhmann et al., 2005]

$$U_n^{(CP)}(\mathbf{r}_A) \equiv \Delta E_n = -\frac{1}{\hbar}\sum_k\sum_\lambda \mathscr{P}\int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega_{kn}+\omega}\int d^3r\left|\langle 0_\lambda\ n|\hat{\mathscr{H}}_{AF}|k\ 1_\lambda\rangle\right|^2, \tag{4.31}$$

où nous avons transformé la somme sur les états Φ en une intégrale et où $\mathscr{P}$ correspond à la partie principale de l'intégrale.

Calculons maintenant les éléments de matrice du hamiltonien d'interaction :

$$\langle 0_\lambda\ n|\hat{\mathscr{H}}_{AF}|k\ 1_\lambda\rangle = -\mathbf{d}_{nk}\cdot\langle 0_\lambda|\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_A)|1_\lambda\rangle\,. \tag{4.32}$$

En utilisant l'expression du champ (4.25) et les relations de commutation des opérateurs bosoniques (4.16) et (4.17), nous trouvons

$$\langle 0_\lambda\ n|\hat{\mathscr{H}}_{AF}|k\ 1_\lambda\rangle = -\mathbf{d}_{nk}\cdot\mathbf{G}_\lambda(\mathbf{r}_A,\mathbf{r},\omega), \tag{4.33}$$

où nous avons également utilisé les relations $|1_\lambda\rangle = \hat{\mathbf{f}}_\lambda^\dagger|0_\lambda\rangle$ et $\hat{\mathbf{f}}_\lambda|0_\lambda\rangle = \mathbf{0}$.

Le décalage en énergie devient alors

$$U_n^{(CP)}(\mathbf{r}_A) = -\frac{1}{\hbar}\sum_e\sum_\lambda \mathscr{P}\int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega_{kn}+\omega}\int d^3r\,\mathbf{d}_{ge}\cdot\mathbf{G}_\lambda(\mathbf{r}_A,\mathbf{r},\omega)\mathbf{G}_\lambda^{*,T}(\mathbf{r}_A,\mathbf{r},\omega)\cdot\mathbf{d}_{eg}, \tag{4.34}$$

soit encore, en utilisant la propriété (4.24),

$$U_n^{(CP)}(\mathbf{r}_A) = -\frac{\mu_0}{\pi}\sum_k \mathscr{P}\int_0^\infty d\omega\frac{\omega^2}{\omega_{kn}+\omega}\mathbf{d}_{nk}\cdot\mathrm{Im}\mathbf{G}(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A,\omega)\cdot\mathbf{d}_{kn}. \tag{4.35}$$

Nous considérons ici un atome en champ proche d'une surface, ainsi nous pouvons décomposer linéairement le tenseur de Green tel que

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A,\omega) = \mathbf{G}^{(0)}(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A,\omega) + \mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A,\omega), \tag{4.36}$$

où $\mathbf{G}^{(0)}(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A,\omega)$ est le tenseur de Green qui décrit une propagation dans le vide et où $\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A,\omega)$ est le tenseur de Green de diffusion, c'est-à-dire le tenseur qui prend en compte le changement de permittivité ou perméabilité lors de la propagation du champ électromagnétique. Le premier terme à droite de la relation (4.36) est notamment responsable du *Lamb shift*, décalage en énergie entre les niveaux 2S et 2P de l'atome d'Hydrogène [Lamb and Retherford, 1947; Milonni, 1994]. Dans notre cas, c'est le second terme qui nous intéresse car il traduit l'interaction entre l'atome et la surface *via* les fluctuations quantiques du vide. Ainsi nous réécrivons le décalage en énergie de l'atome sous la forme

$$U_n^{(CP)}(\mathbf{r}_A) = -\frac{\mu_0}{\pi}\sum_k \mathscr{P}\int_0^\infty d\omega\frac{\omega^2}{\omega_{kn}+\omega}\mathbf{d}_{nk}\cdot\mathrm{Im}\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A,\omega)\cdot\mathbf{d}_{kn} \tag{4.37}$$

Nous allons voir que nous pouvons simplifier davantage cette expression en utilisant des astuces mathématiques développées en analyse complexe.

4.2.3 Techniques d'intégration dans le plan complexe

L'effet Casimir-Polder résulte des fluctuations quantiques du vide. Le spectre des fréquences contribuant à ces fluctuations est très large, ce qui impose un domaine d'intégration fréquentiel très grand. C'est une complication numérique que l'on rencontre rarement en photonique. De plus les champs qui vont être diffusés par la surface sont des fonctions qui vont osciller très rapidement à cause des interférences constructives et destructives entre les champs électromagnétiques qui se propagent entre l'atome et la surface. On se retrouve alors à résoudre numériquement une intégrale sur une large bande de fréquence qui peut osciller très rapidement. Numériquement il faut une large bande d'intégration et une grande précision dans cette bande, ce qui est très coûteux en ressources de calcul. Pour contourner ce problème on utilise des techniques d'analyse complexe afin de changer le chemin d'intégration dans le plan complexe. Autrement dit, nous allons non plus intégrer sur les fréquences réelles mais sur les fréquences imaginaires. Ainsi, un champ électrique initialement de la forme $\mathbf{E} \propto e^{i\omega r/c - i\omega t}$ deviendra, après passage dans l'espace de Fourier et changement de variable d'intégration, $\mathbf{E} \propto e^{-\xi r/c}$, où l'on note ξ les fréquences imaginaires telles que $\omega = i\xi$. On a alors un terme exponentiellement décroissant avec la fréquence. Le passage dans l'espace de Fourier permet de se séparer de la dépendance temporelle.

Il est important de souligner que ces techniques d'intégration de contour peuvent être utilisées ici en raison des propriétés du tenseur de Green. En effet, le tenseur de Green est une fonction causale et par conséquent analytique dans le plan supérieur des fréquences complexes ($\mathrm{Im}\omega > 0$). La relation (4.37) peut se réécrire

$$U_n^{(\mathrm{CP})}(\mathbf{r}) = -\frac{\mu_0}{2i\pi}\sum_k \mathscr{P}\int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2}{\omega_{kn}+\omega}\mathbf{d}_{nk}\cdot\left[\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_\mathrm{A},\mathbf{r}_\mathrm{A},\omega) - \mathbf{G}^{(1)^*}(\mathbf{r}_\mathrm{A},\mathbf{r}_\mathrm{A},\omega)\right]\cdot\mathbf{d}_{kn}. \tag{4.38}$$

Or le tenseur de Green de diffusion, qui dépend des coefficients de réflexion de la surface, obéit au principe de réflexion de Schwarz : $\mathbf{G}^{(1)^*}(\mathbf{r}_\mathrm{A},\mathbf{r}_\mathrm{A},\omega) = \mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_\mathrm{A},\mathbf{r}_\mathrm{A},-\omega^*)$ (voir par exemple l'appendice B de [Buhmann, 2012a]). Ainsi la relation (4.38) devient

$$U_n^{(\mathrm{CP})}(\mathbf{r}_\mathrm{A}) = \frac{\mu_0}{2i\pi}\sum_k\left[\mathscr{P}\int_0^\infty d\omega\frac{\omega^2}{\omega_{nk}-\omega}\mathbf{d}_{nk}\cdot\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_\mathrm{A},\mathbf{r}_\mathrm{A},\omega)\cdot\mathbf{d}_{kn} + \mathscr{P}\int_0^{-\infty} d\omega\frac{\omega^2}{\omega_{nk}+\omega}\mathbf{d}_{nk}\cdot\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_\mathrm{A},\mathbf{r}_\mathrm{A},\omega)\cdot\mathbf{d}_{kn}\right]. \tag{4.39}$$

Nous notons $f_+(\omega)$ et $f_-(\omega)$ les intégrants des intégrales sur les fréquences positives et négatives de (4.39), respectivement. Ces fonctions sont analytiques et finies, excepté aux pôles $\omega = \mp\omega_{nk}$ avec $\omega_{nk} > 0$. Ainsi d'après le théorème des résidus de Cauchy, si nous suivons les intégrations sur les contours $\mathscr{C}_1$ et $\mathscr{C}_2$ schématisés sur la Fig.4.2, nous avons respectivement [Brown and Churchill, 2009]

$$\mathscr{P}\int_0^\infty d\omega f_+(\omega) + i\int_\infty^0 d\xi f_+(i\xi) + \lim_{|\omega|\to\infty}\int_0^{\pi/2} i\omega f_+(\omega)d\phi = i\pi\operatorname*{Res}_{\omega=\omega_{nk}} f_+(\omega), \tag{4.40a}$$

$$\mathscr{P}\int_0^{-\infty} d\omega f_-(\omega) + i\int_\infty^0 d\xi f_-(i\xi) + \lim_{|\omega|\to\infty}\int_\pi^{\pi/2} i\omega f_-(\omega)d\phi = i\pi\operatorname*{Res}_{\omega=-\omega_{nk}} f_-(\omega), \tag{4.40b}$$

où nous rappelons la définition de la partie principale :

$$\mathscr{P}\int_0^{\pm\infty} f_\pm(\omega)d\omega = \lim_{\delta\to 0^+}\left(\int_0^{\pm\omega_{nk}\mp\delta} f_\pm(\omega)d\omega + \int_{\pm\omega_{nk}\mp\delta}^{\pm\infty} f_\pm(\omega)d\omega\right). \tag{4.41}$$

Les termes à droite des égalités (4.40a) et (4.40b) correspondent aux résidus des fonctions aux différents pôles $\omega = \pm\omega_{nk}$, ils sont donnés par

$$\operatorname*{Res}_{\omega=\pm\omega_{nk}} f_\pm(\omega) = \Phi_\pm(\pm\omega_{nk}), \tag{4.42}$$

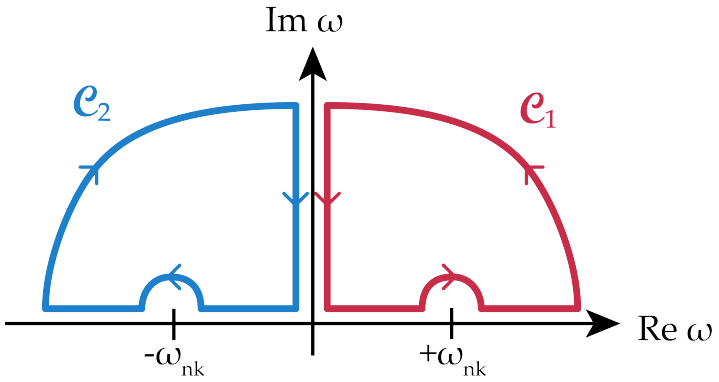


FIGURE 4.2 – **Définition des contours pour l'intégration sur les fréquences imaginaires.** Le théorème de Cauchy permet de transformer l'intégrale sur les fréquences réelles en une intégrale sur les fréquences imaginaires en définissant deux contours $\mathscr{C}_1$ (rouge) et $\mathscr{C}_2$ (bleu). Les pôles $\omega = \pm\omega_{nk}$ sont contournés de manière infinitésimale ($\delta \to 0^+$, cf. texte).

où nous avons posé $f_\pm(\omega) = \Phi_\pm(\omega)/(|\omega| \mp \omega_{nk})$ avec $\Phi_\pm(\omega)$ une fonction analatyque et non-nulle aux pôles.

Étudions le comportement du tenseur de Green aux hautes fréquences. Pour cela on se rappelle de l'équation de propagation du tenseur de Green (4.13) qui devient, pour $|\omega| \to \infty$,

$$\lim_{|\omega|\to\infty} \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) = -\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \tag{4.43}$$

car nous rappelons qu'un matériau est transparent à haute fréquence, *i.e.*, $\lim_{|\omega|\to\infty} \epsilon(\mathbf{r},\omega), \mu(\mathbf{r},\omega) = 1$. Dans le vide, l'équation de propagation (4.13) devient

$$\left[\nabla\times\nabla\times - \frac{\omega^2}{c^2}\right]\mathbf{G}^{(0)}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \tag{4.44}$$

ce qui signifie que

$$\lim_{|\omega|\to\infty} \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{G}^{(0)}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) = -\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{4.45}$$

Ainsi, en se souvenant de la décomposition du tenseur de Green (4.36) nous en déduisons, avec (4.43) et (4.45),

$$\lim_{|\omega|\to\infty} \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) = \mathbf{0}. \tag{4.46}$$

Cette limite à haute fréquence nous permet de réécrire les intégrations sur les contours (4.40a) et (4.40b) telles que

$$\mathscr{P}\int_0^\infty d\omega f_+(\omega) = i\int_0^\infty d\xi f_+(i\xi) - i\pi\omega_{nk}^2 \mathbf{d}_{nk}\cdot\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A,\omega_{nk})\cdot\mathbf{d}_{kn}, \tag{4.47a}$$

$$\mathscr{P}\int_0^{-\infty} d\omega f_-(\omega) = i\int_0^\infty d\xi f_-(i\xi) - i\pi\omega_{nk}^2 \mathbf{d}_{nk}\cdot\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A,\omega_{nk})\cdot\mathbf{d}_{kn}, \tag{4.47b}$$

où nous avons exprimé les résidus d'après la définition (4.42). Finalement ces relations nous permettent d'écrire le décalage en énergie (4.39) sous la forme suivante :

$$\mathrm{U}_n^{(\mathrm{CP})}(\mathbf{r}_A) = \mathrm{U}_n^{nres}(\mathbf{r}_A) + \mathrm{U}_n^{res}(\mathbf{r}_A), \tag{4.48}$$

avec la partie non-résonante

$$\mathrm{U}_n^{nres}(\mathbf{r}_A) = \frac{\mu_0}{\pi}\sum_k \int_0^\infty d\xi \frac{\xi^2\omega_{kn}}{\omega_{kn}^2+\xi^2}\mathbf{d}_{nk}\cdot\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A,i\xi)\cdot\mathbf{d}_{kn}, \tag{4.49}$$

et la partie résonante

$$U_n^{res}(\mathbf{r}_A) = -\mu_0 \sum_{k<n} \omega_{nk}^2 \mathbf{d}_{nk} \cdot \mathrm{Re}\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_A, \omega_{nk}) \cdot \mathbf{d}_{kn}. \tag{4.50}$$

Pour cette dernière relation nous avons utilisé le principe de Schwarz (voir plus haut) ainsi que la relation : $\mathrm{Re}\,\mathbf{G}^{(1)} = \left(\mathbf{G}^{(1)} + \mathbf{G}^{(1)*}\right)/2$. Par ailleurs ce terme (4.50) est non-nul seulement si une ou plusieurs désexcitation(s) de l'atome d'un état n vers un niveau inférieur k est possible, *i.e.*, s'il est dans un état excité. En effet, si l'atome est dans l'état fondamental, alors il n'existe pas de pôles dans les intégrations de contour, on se retrouve alors uniquement avec la partie non-résonante (4.49).

Nous avons effectué un changement d'intégration en passant des fréquences réelles aux fréquences imaginaires afin de rendre le problème numériquement stable. Il est cependant possible de simplifier cette formule en introduisant la polarisabilité atomique. Cela permet de rendre ces formules mathématiques davantage "physiques".

4.2.4 Potentiels énergétiques en terme de polarisabilité atomique

Dans le chapitre précédent nous avons défini la polarisabilité atomique comme la réponse optique de l'atome sous l'influence d'un champ électromagnétique, donnée au premier ordre par (3.32), soit pour un état quelconque n :

$$\boldsymbol{\alpha}_n(\omega) = \sum_k \frac{2\omega_{kn}\mathbf{d}_{nk}\mathbf{d}_{kn}}{\hbar\left(\omega_{kn}^2 - \omega^2\right)}. \tag{4.51}$$

Nous attirons ici l'attention du lecteur sur l'expression du moment dipolaire $\mathbf{d}_{nk}$ qui s'exprime, pour reprendre les notations du chapitre précédent, tel que $\mathbf{d}_{nk} = \langle J_n \,||\mathbf{d}||\, J_k \rangle / \sqrt{2J_n + 1}$, où $\langle J_n \,||\mathbf{d}||\, J_k \rangle$ est l'élément de matrice réduit du dipôle électrique, dont les valeurs pour les différentes transitions sont données dans les Tableaux 3.2 et 3.3. Ainsi nous retrouvons l'expression de la polarisabilité scalaire (3.55) définie au chapitre précédent. En effet, l'état 5S étant à symétrie sphérique, la polarisabilité de l'état fondamental est scalaire. Par ailleurs, nous considérons également l'atome excité dans un état isotropique. Cela peut se justifier en notant que le décalage énergétique dû aux champs optiques (*i.e.*, par effet Stark) est plus important que celui induit par les forces du vide (nous aborderons ce point dans le dernier chapitre). Dans le premier cas, comme nous l'avons vu en fin de chapitre précédent en section 3.3.3, nous tenons compte de la partie tensorielle de la polarisabilité.

A présent nous pouvons utiliser cette expression dans (4.49) pour obtenir

$$U_n^{nres}(\mathbf{r}_A) = \frac{\hbar\mu_0}{2\pi} \int_0^\infty \xi^2 d\xi \; \mathrm{Tr}\left[\boldsymbol{\alpha}_n(i\xi) \cdot \mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_A, i\xi)\right]. \tag{4.52}$$

Nous avons maintenant une vision plus claire de cette interaction atome-nanostructure. Les fluctuations quantiques du vide génèrent des photons virtuels sur une large bande de fréquence qui interagissent alors avec l'atome et la surface dont les réponses optiques sont caractérisées par la polarisabilité $\boldsymbol{\alpha}_n$ et le tenseur de diffusion $\mathbf{G}^{(1)}$, respectivement. Ce dernier contient toutes les informations relatives à la nanostructure, notamment les coefficients de réflexion en amplitude qui nous permettront de calculer cette interaction.

4.2.5 Polarisabilité et permittivité en fréquences imaginaires

Comme mentionné dans la section précédente, nous considérons un atome isotrope tel que $\mathbf{d}_{nk}\mathbf{d}_{kn} = \mathbb{1}\,|\mathbf{d}_{kn}|^2/3$. Ainsi nous pouvons réécrire la polarisabilité (4.51) sous la forme

$$\boldsymbol{\alpha}_n(i\xi) = \alpha_n(i\xi)\mathbb{1} = \sum_k \frac{2\omega_{kn}|\mathbf{d}_{kn}|^2}{3\hbar\left(\omega_{kn}^2 + \xi^2\right)}\mathbb{1}. \tag{4.53}$$

Nous avons écrit la polarisabilité atomique sur les fréquences imaginaires dont l'évolution fait disparaître toute singularité. Ceci se confirme en Fig.4.3(a) où nous traçons la polarisabilité atomique $\alpha_{5S}(i\xi)$ de l'état fondamental du ^{87}Rb, cette fonction est continue et devient négligeable pour des fréquences angulaires au-delà de 10^{17} rad/s ($\equiv \lambda \sim 100 a_0$).

Comme nous le verrons en section 4.3, le calcul du tenseur de green de diffusion de la surface $G^{(1)}$ fait intervenir la permittivité évaluée pour des fréquences imaginaires. Nous précisons ci-dessous la manière dont la permittivité a été évaluée sur l'ensemble de la gamme de fréquence étudiée dans ce manuscrit. La permittivité en fréquence imaginaire s'exprime à partir des relations de Kramers-Kronig [Landau and Lifshitz, 1980] :

$$\varepsilon(i\xi) = 1 + \int_0^\infty \frac{\omega \mathrm{Im}\varepsilon(\omega)}{\omega^2 + \xi^2} d\omega, \tag{4.54}$$

où $\varepsilon(\omega)$ est la permittivité en fréquences réelles. Les valeurs de $\mathrm{Im}\varepsilon(\omega)$ sont tirées des valeurs expérimentales de [Palik, 1998] sur une bande de fréquence $[\omega_{min}^{exp}, \omega_{max}^{exp}]$. Pour obtenir les valeurs de $\varepsilon(i\xi)$ aux basses fréquences, nous extrapolons par le modèle de Drude, soit

$$\varepsilon(i\xi) = 1 + \int_0^{\omega_{min}^{exp}} \frac{\omega \mathrm{Im}\varepsilon^{Dr}(\omega)}{\omega^2 + \xi^2} d\omega + \int_{\omega_{min}^{exp}}^{\omega_{max}^{exp}} \frac{\omega \mathrm{Im}\varepsilon^{exp}(\omega)}{\omega^2 + \xi^2} d\omega, \tag{4.55}$$

où $\varepsilon^{Dr}(\omega)$ est donnée par (3.7). Les fréquences au-delà de ω_{max}^{exp} ont un rôle négligeable dans l'intégrale. Nous présentons en Fig.4.3(b) les permittivités diélectriques pour de l'or (Au), du verre (SiO_2) et du silicium (Si) en fonction des fréquences imaginaires $\omega = i\xi$. Ces fonctions décroissantes avec la fréquence sont continues et positives. De plus nous constatons que les matériaux deviennent transparents pour des fréquences supérieures à 10^{17} rad/s.

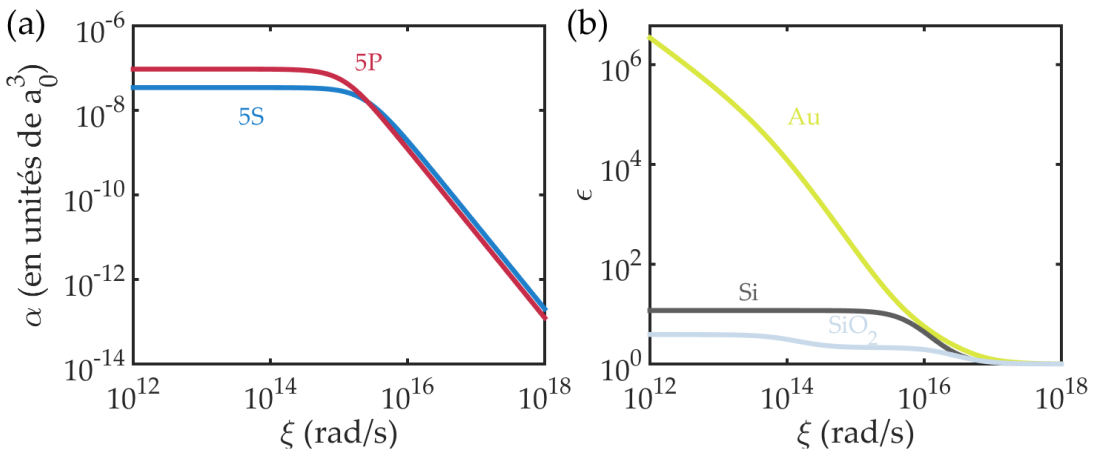


FIGURE 4.3 – **Polarisabilité atomique du ^{87}Rb et permittivité diélectrique des matériaux de la surface aux fréquences imaginaires.** En fonction des fréquences imaginaires définies telles que $\omega = i\xi$, nous traçons (a) les polarisabilités atomiques des états fondamental $5S_{1/2}$ (bleu) et excité $5P_{3/2}$ (rouge) de l'atome de ^{87}Rb et (b) les permittivitités diélectriques de l'or $\varepsilon_{Au}(i\xi)$ (jaune), du silicium $\varepsilon_{Si}(i\xi)$ (gris) et du verre $\varepsilon_{SiO2}(i\xi)$ (bleu).

4.2.6 Contribution thermique

Nous venons de déterminer l'interaction entre un atome et un object macroscopique due aux fluctuations quantiques du vide à température nulle. Nous avons ainsi considéré le champ électromagnétique dans son état fondamental $|0_\lambda\rangle$, mais ceci n'est exact qu'à température nulle. Pour une température ambiante non-nulle, une contribution supplémentaire due aux photons thermiques s'ajoute au potentiel déterminé précédemment [Dalvit et al.,

2011]. Cette contribution thermique a été observée expérimentalement dans les configurations atome-surface [Obrecht et al., 2007] puis surface-surface [Sushkov et al., 2011]. Par conséquent il est légitime de s'interroger sur l'influence des fluctuations thermiques à proximité de la structure dans notre configuration.

Comme nous avons pu le voir au début du Chapitre 1 (cf. équation (1.3)), la population du champ électromagnétique dans un mode à la fréquence ω à la température T est donnée par la statistique de Bose-Einstein, soit

$$n(\omega) = \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}, \tag{4.56}$$

où le premier terme décrit l'énergie du point zéro (fluctuations du vide) tandis que le second correspond à la fraction de photons thermiques présents dans le champ électromagnétique. Le calcul s'effectue de manière identique au cas à température nulle, à la différence que maintenant nous devons sommer sur les différentes probabilités d'occupation des modes thermiques du champ. On montre alors que l'intégrale sur les fréquences imaginaires dans la partie non-résonante (4.52) devient une somme sur les fréquences de Matsubara $\xi_j = j2\pi k_B T/\hbar$, telle que [Buhmann, 2012b]

$$\frac{\hbar}{2\pi}\int_0^\infty d\xi f(i\xi) \to k_B T \sum_{j=0}^{\infty}{}' f(i\xi_j), \tag{4.57}$$

où la somme $\sum_{j=0}^{\infty}{}'$ porte sur les entiers j dont le terme $j = 0$ est compté avec un poids $1/2$. Concernant la partie résonante (4.50), la présence de photons thermiques (réels) modifie également la somme, initialement sur les éventuelles émissions spontanées. En effet, le potentiel énergétique de l'état excité peut maintenant subir des émissions stimulées et voit sa somme modifiée telle que [Buhmann, 2012b]

$$\sum_{k<n} f(\omega_{nk}) \to \sum_{k<n} [n(\omega_{nk}) + 1] f(\omega_{nk}) - \sum_{k>n} n(\omega_{kn}) f(\omega_{kn}). \tag{4.58}$$

Pour étudier l'influence des fluctuations thermiques *vs.* les fluctuations quantiques, nous considérons un atome de ^{87}Rb dans l'état fondamental $5S_{1/2}$ à une position z_a d'un milieu semi-infini en or. Dans cet état atomique (*i.e.*, isotropique), la polarisabilité est donnée par (4.53). Nous traçons en Fig.4.4 l'évolution du rapport du potentiel $U_{5S}^{(CP),T=0}(z_a)$ donné par (4.48) (soit encore (4.52) car l'atome est dans l'état fondamental) sur le potentiel d'interaction pour une température ambiante de 300 K, $U_{5S}^{(CP),T=300}(z_a)$ calculé à partir de la discrétisation de l'intégration (4.57). Les détails des calculs, notamment l'expression du tenseur de diffusion, seront donnés dans la section suivante. Nous constatons une différence entre les potentiels CP lorsque la distance entre l'atome et la surface devient supérieure à 3 µm environ. Nous aurions pu anticiper ce résultat en notant que les photons thermiques ont une longueur d'onde thermique définie par $\lambda_T = \hbar c/k_B T \simeq 7.6$ µm. Par conséquent leur effet devient non négligeable lorsque $z_a \gtrsim \lambda_T$.

Le nuage d'atomes que nous souhaitons piéger se trouve à des distances inférieures au micron. Puisque la contribution thermique est négligeable à ces positions, dans la suite du manuscrit, les potentiels CP seront calculés à partir des formules à température nulle, données par (4.52) et (4.50).

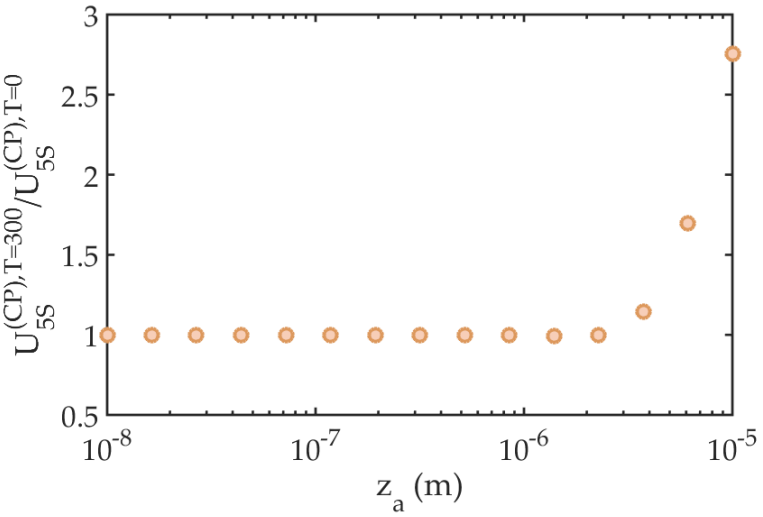


FIGURE 4.4 – **Évolution des potentiels CP à température nulle et à T=300 K en fonction de la distance atome-surface.** Le rapport des potentiels d'interaction pour l'état $5S_{1/2}$ du ^{87}Rb à température ambiante T=300 K et à température nulle entre un atome à la position z_a d'une structure semi-infinie en or.

4.3 Interaction atome-surface

Nous disposons à présent de tous les outils pour calculer l'interaction CP entre un atome de ^{87}Rb et la nanostructure. Nous commençons par calculer l'interaction entre l'atome et la surface plane stratifiée optimisée au chapitre précédent.

4.3.1 Surface plane et stratifiée

Dans cette partie nous exprimerons dans un premier temps le tenseur de Green caractérisant la surface plane et stratifiée puis nous donnerons les expressions des coefficients de réflexion en amplitude qui interviennent dans son calcul. Nous utiliserons ensuite les résultats obtenus pour calculer les potentiels d'interaction lorsque l'atome est dans l'état fondamental puis dans l'état excité. Nous rappelons que l'optimisation de la structure nous a mené au profil géométrique présenté en Fig.3.11. Nous schématisons en Fig.4.5 la configuration correspondante. Nous dénotons ainsi les couches par des indices numériques.

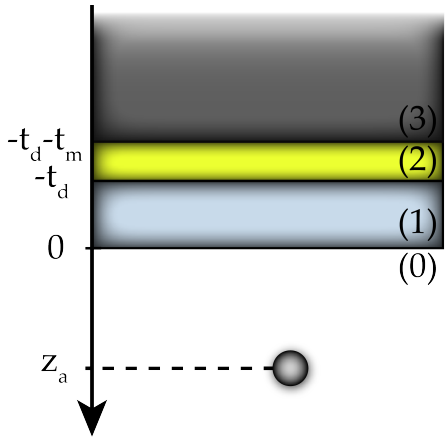


FIGURE 4.5 – **Schéma de la configuration utilisée pour le calcul de l'interaction CP entre l'atome de ^{87}Rb et de la structure plane stratifiée.** Un atome de ^{87}Rb dans le vide (milieu noté 0) est à la position z_a d'une surface plane composée d'une couche de SiO_2 (1), de Au (2) et de Si (3) d'épaisseurs t_d, t_m et infinie, respectivement.

Tenseur de Green

Dans le cas de la surface plane multi-couches schématisée en Fig.4.5, le tenseur de Green est donné par [Chew, 1995]

$$\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_a,\mathbf{r}_a,\omega)=\frac{i}{8\pi^2}\int_0^\infty \frac{d^2k_\parallel}{k_{z,0}}\sum_\sigma \mathbf{e}_{\sigma+}\mathbf{e}_{\sigma-}r_\sigma^0 e^{2ik_{z,0}z_a}, \tag{4.59}$$

où la somme porte sur les polarisations $\sigma = s, p$ (définies aux début du chapitre précédent) et où le vecteur d'onde de propagation du champ électromagnétique dans le milieu 0 (vide) est défini tel que

$$\mathbf{k}_0=(\mathbf{k}_\parallel,k_{z,0}), \tag{4.60}$$

avec $\mathbf{k}_\parallel$ la composante du vecteur d'onde parallèle à l'interface et

$$k_{z,j}=\sqrt{\varepsilon_j(\omega)\frac{\omega^2}{c^2}-\mathbf{k}_\parallel^2},\quad \mathrm{Im}\,k_{z,j}>0, \tag{4.61}$$

la composante perpendiculaire à l'interface dans le milieu j.

Les vecteurs de polarisation $\mathbf{e}_{\sigma\pm}$ (les signes + et - correspondant à la direction selon (Oz)) sont définis par

$$\mathbf{e}_{s\pm}=\mathbf{e}_{k_\parallel}\times\mathbf{e}_z \quad\text{et}\quad \mathbf{e}_{p\pm}=\frac{1}{k_0}\left(k_\parallel\mathbf{e}_z\mp k_{z,0}\mathbf{e}_{k_\parallel}\right), \tag{4.62}$$

soit en coordonnées polaires :

$$\mathbf{e}_{s\pm}=\begin{pmatrix}\sin\theta\\-\cos\theta\\0\end{pmatrix}\quad\text{et}\quad \mathbf{e}_{p\pm}=\frac{1}{k_0}\begin{pmatrix}\mp k_{z,0}\cos\theta\\\mp k_{z,0}\sin\theta\\k_\parallel\end{pmatrix}. \tag{4.63}$$

Le terme r_σ^0 correspond au coefficient de réflexion en amplitude en polarisation σ.

Le tenseur $\mathbf{G}^{(1)}$ décrit la propagation d'un champ incident à la fréquence ω initialement créé en z_a qui se propage vers la surface selon un vecteur polarisation $e_{\sigma-}$. Une partie de ce champ, quantifiée par r_σ^0, est ensuite réfléchie par la structure en polarisation σ dont la propagation est caractérisée par $e_{\sigma+}$. Le terme exponentiel dans l'expression (4.59) traduit cet aller-retour du champ. Par ailleurs, la somme sur les deux polarisations possibles contient deux termes correspondant aux produits tensoriels des vecteurs polarisation qui se calculent facilement et donnent

$$\mathbf{e}_{s+}\mathbf{e}_{s-}=\begin{pmatrix}\sin^2\theta & -\sin\theta\cos\theta & 0\\-\sin\theta\cos\theta & \cos^2\theta & 0\\0 & 0 & 0\end{pmatrix}, \tag{4.64}$$

$$\mathbf{e}_{p+}\mathbf{e}_{p-}=\frac{1}{k_0}\begin{pmatrix}-k_{z,0}^2\cos^2\theta & -k_{z,0}^2\sin\theta\cos\theta & -k_\parallel k_{z,0}\cos\theta\\-k_{z,0}^2\sin\theta\cos\theta & -k_{z,0}^2\sin^2\theta & -k_\parallel k_{z,0}\sin\theta\\k_\parallel k_{z,0}\cos\theta & k_\parallel k_{z,0}\sin\theta & k_\parallel^2\end{pmatrix}. \tag{4.65}$$

En notant que $\int_0^\infty d^2k_\parallel/k_{z,0}=\int_0^\infty k_\parallel dk_\parallel\int_0^{2\pi}d\theta$ et en utilisant les résultats précédents, le tenseur de diffusion (4.59) peut s'écrire

$$\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_a,\mathbf{r}_a,\omega)=\frac{i}{8\pi}\int_0^\infty k_\parallel dk_\parallel e^{2ik_{z,0}z_a}\left[\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix}r_s^0+\frac{1}{k_0^2}\begin{pmatrix}-k_{z,0}^2&0&0\\0&-k_{z,0}^2&0\\0&0&2k_\parallel^2\end{pmatrix}r_p^0\right], \tag{4.66}$$

où l'intégration sur θ a été effectuée.

Nous pouvons décomposer cette expression afin de séparer les contributions des modes propagatifs ($0\le k_\parallel\le k_0=\omega/c$) et des modes évanescents ($k_\parallel>k_0$). Dans ce dernier cas le

vecteur d'onde devient imaginaire, *i.e.*, les champs électromagnétiques associés sont évanescents, et nous avons

$$k_{z,0} = i\kappa_{z,0} = i\sqrt{k_\parallel^2 - \frac{\omega^2}{c^2}}. \tag{4.67}$$

Ceci étant posé nous pouvons réécrire l'intégrale sur la composante parallèle à l'interface telle que

$$\int_0^\infty k_\parallel dk_\parallel \equiv \int_0^{\omega/c} k_\parallel dk_\parallel + \int_{\omega/c}^\infty k_\parallel dk_\parallel \equiv \int_0^{\omega/c} dk_{z,0} - i\int_{\omega/c}^\infty d\kappa_{z,0}. \tag{4.68}$$

Le tenseur de Green de diffusion aux fréquences réelles (4.66) est ainsi donné par

$$\begin{aligned}\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_a,\mathbf{r}_a,\omega) =& \frac{i}{8\pi}\int_0^{\omega/c} dk_{z,0} e^{2ik_{z,0}z_a}\left[\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix} r_s^0 + \frac{1}{k_0^2}\begin{pmatrix}-k_{z,0}^2&0&0\\0&-k_{z,0}^2&0\\0&0&2k_\parallel^2\end{pmatrix} r_p^0\right] \\ &+ \frac{1}{8\pi}\int_{\omega/c}^\infty d\kappa_{z,0} e^{-2\kappa_{z,0}z_a}\left[\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix} r_s^0 + \frac{c^2}{\omega^2}\begin{pmatrix}\kappa_{z,0}^2&0&0\\0&\kappa_{z,0}^2&0\\0&0&2k_\parallel^2\end{pmatrix} r_p^0\right].\end{aligned} \tag{4.69}$$

Par ailleurs, afin de calculer la partie non-résonante (4.52) nous devons écrire le tenseur de Green aux fréquences imaginaires $\omega = i\xi$. Nous notons que la composante du vecteur d'onde perpendiculaire à l'interface (4.67) est alors toujours imaginaire et se note

$$k_{z,0} = i\kappa_{z,0} = i\sqrt{k_\parallel^2 + \frac{\xi^2}{c^2}}. \tag{4.70}$$

Par conséquent nous pouvons écrire le tenseur de Green (4.66) sous la forme

$$\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_a,\mathbf{r}_a,i\xi) = \frac{1}{8\pi}\int_{\xi/c}^\infty d\kappa_{z,0} e^{-2\kappa_{z,0}z_a}\left[\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix} r_s^0 - \frac{c^2}{\xi^2}\begin{pmatrix}\kappa_{z,0}^2&0&0\\0&\kappa_{z,0}^2&0\\0&0&2k_\parallel^2\end{pmatrix} r_p^0\right]. \tag{4.71}$$

Calculer l'énergie d'interaction de Casimir-Polder consiste en fait à sommer toutes les configurations de champs incidents possibles (polarisation, angle d'incidence, fréquences). Il est maintenant nécessaire de calculer les coefficients de réflexion $r_\sigma^0 \equiv r_\sigma^0(k_\parallel,\omega)$ afin de connaître la réponse optique de la structure pour chaque combinaison $(\sigma, k_\parallel, \omega)$. C'est ce que nous allons à présent déterminer.

Coefficients de réflexion

Dans le cas d'une surface plane, les coefficients de réflexion en amplitude sont simplement donnés par les relations de Fresnel. Pour une structure multi-couches on montre que les coefficients en amplitude sont données à partir des relations récursives suivantes [Chew, 1995] :

$$r_s^j = r_s^j(k_\parallel,\omega) = \frac{(k_{z,j}-k_{z,j+1}) + (k_{z,j}+k_{z,j+1})e^{2ik_{z,j}t_j} r_s^{j+1}}{(k_{z,j}+k_{z,j+1}) + (k_{z,j}-k_{z,j+1})e^{2ik_{z,j}t_j} r_s^{j+1}}, \tag{4.72a}$$

$$r_p^j = r_p^j(k_\parallel,\omega) = \frac{(\varepsilon_{j+1}k_{z,j}-\varepsilon_j k_{z,j+1}) + (\varepsilon_{j+1}k_{z,j}+\varepsilon_j k_{z,j+1})e^{2ik_{z,j}t_j} r_p^{j+1}}{(\varepsilon_{j+1}k_{z,j}+\varepsilon_j k_{z,j+1}) + (\varepsilon_{j+1}k_{z,j}-\varepsilon_j k_{z,j+1})e^{2ik_{z,j}t_j} r_p^{j+1}}, \tag{4.72b}$$

où l'on note t_j l'épaisseur du milieu j et où $\varepsilon_j \equiv \varepsilon_j(\omega)$, $k_{z,j} \equiv k_{z,j}(\omega, k_\parallel)$.

Aux fréquences imaginaires ces coefficients se calculent de la même manière en effectuant le remplacement suivant : $\omega = i\xi$ et $k_{z,j} = i\kappa_{z,j}$.

État fondamental

Nous considérons l'atome de ^{87}Rb dans son état fondamental $5S_{1/2}$. Seule la partie non-résonante (4.52) contribue au potentiel d'interaction qui s'écrit alors, d'après la polarisabilité (4.53),

$$U_{5S}^{(CP)}(\mathbf{r}_a) = \frac{\hbar\mu_0}{2\pi}\int_0^\infty \xi^2 d\xi \alpha_{5S}(i\xi)\mathrm{Tr}\,\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_a,\mathbf{r}_a,i\xi). \tag{4.73}$$

En calculant la trace du tenseur de Green aux fréquences imaginaires donné par (4.71), le potentiel d'interaction se met finalement sous la forme

$$U_{5S}^{(CP)}(z_a) = \frac{\hbar\mu_0}{8\pi^2}\int_0^\infty \xi^2\alpha_{5S}(i\xi)d\xi\int_{\xi/c}^\infty d\kappa_{z,0}e^{-2\kappa_{z,0}z_a}\left[r_s^0 - \left(2\frac{c^2\kappa_{z,0}^2}{\xi^2}-1\right)r_p^0\right]. \tag{4.74}$$

Nous possédons à présent tous les ingrédients pour calculer l'interaction entre un atome de ^{87}Rb dans son état fondamental et une structure plane multi-couches. Afin de valider nos résultats nous les comparons aux asymptotes analytiques pour de faibles ou de larges distances de séparation, correspondant respectivement au régime non-retardé ($z_a << \lambda_0$) et retardé ($z_a >> \lambda_0$), également appelés régime van der Waals (vdW) et régime Casimir-Polder (CP). Nous les avons introduits dans la section 4.1.2 (cf. équations (4.1) et (4.2)) mais elles peuvent également s'obtenir facilement à partir de (4.74).

Nous considérons un milieu métallique parfaitement conducteur (PEC pour *Perfectly Electric Conductor* en anglais) et semi-infini. Les coefficients de réflexion en amplitude valent alors $r_s = -1$ et $r_p = 1$, et le potentiel (4.74) devient

$$\begin{aligned} U_{5S-PEC}^{(CP)}(z_a) &= -\frac{\hbar}{4\pi^2\varepsilon_0}\int_0^\infty \alpha_{5S}(i\xi)d\xi\int_{\xi/c}^\infty \kappa_{z,0}^2 e^{-2\kappa_{z,0}z_a}d\kappa_{z,0} \\ &= -\frac{\hbar}{16\pi^2\varepsilon_0 z_a^3}\int_0^\infty d\xi\alpha_{5S}(i\xi)e^{-2z_a\xi/c}\left[1+2\frac{\xi z_a}{c}+2\left(\frac{\xi z_a}{c}\right)^2\right], \end{aligned} \tag{4.75}$$

où la seconde ligne s'obtient en effectuant un simple changement de variable et en utilisant la relation mathématique $\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x}dx = n!/\alpha^{n+1}$.

Pour de faibles distances nous avons $z_a\xi/c << 1$ ou de manière équivalente $c\to\infty$, *i.e.*, les phénomènes se déroulent instantanément. En négligeant les termes correspondants, l'intégration porte finalement sur la polarisabilité atomique uniquement dont l'échelle caractéristique de décroissance est $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ (comme le montre la Fig.4.3). Dans ce régime nous avons $k_0 z_a << 1$, ainsi le terme exponentiel tend vers 1 et d'après l'expression de la polarisabilité (4.53), nous obtenons le résultat suivant après intégration :

$$U_{5S-PEC}^{(CP)}(z_a) = -\frac{1}{48\pi\varepsilon_0 z_a^3}\sum_k |\mathbf{d}_{k0}|^2 = -\frac{\langle 0|\mathbf{d}^2|0\rangle}{48\pi\varepsilon_0 z_a^3}, \tag{4.76}$$

où nous avons utilisé ici la relation $\int_0^\infty 1/(1+x^2)dx = \mathrm{atan}(x)$. Par ailleurs nous utilisons également la relation de fermeture $\sum_k \mathbf{d}_{kn}\mathbf{d}_{nk} = \langle\mathbf{dd}\rangle_n$. Nous retrouvons l'expression du potentiel de Lennard-Jones (4.1).

Pour de plus grandes distances (régime retardé : $z_a\xi/c >> 1$) le terme exponentiel décroit plus rapidement que la polarisabilité. Cette dernière peut ainsi être remplacée par son expression statique : $\alpha(i\xi) \simeq \alpha(0)$. Finalement après intégration nous trouvons

$$U_{5S-PEC}^{(CP)}(z_a) = -\frac{3\hbar c\alpha_{5S}(0)}{32\pi^2\varepsilon_0 z_a^4}. \tag{4.77}$$

Nous retrouvons ici le potentiel déterminé par Casimir et Polder (4.2) pour de larges distances de séparation.

Nous considérons l'atome de ^{87}Rb et une surface en or semi-infinie dont la configuration est schématisée en Fig.4.6(a). Le calcul exact de l'énergie d'interaction, donné par (4.74), est comparé en Fig.4.6(b) aux résultats asymptotiques des régimes non-retardé (ou vdW) et retardé (ou CP) donnés par (4.76) et (4.77), respectivement. Le potentiel se superpose bien aux asymptotes correspondantes à ces deux régimes.

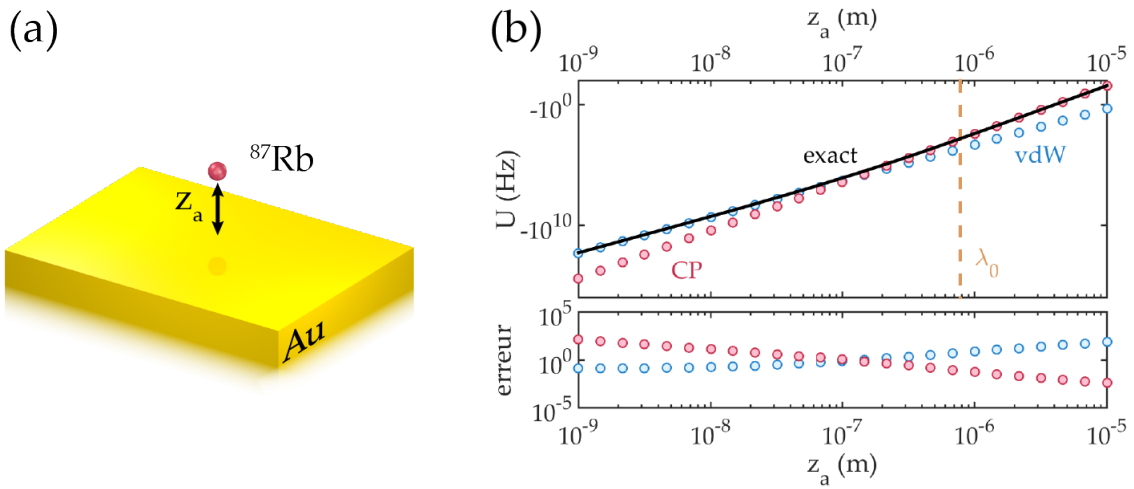


FIGURE 4.6 – **Comparaison du potentiel exact caractérisant l'interaction entre un atome de ^{87}Rb et un milieu semi-infini en or avec les asymptotes dans les régimes non-retardé et retardé.** (a) Un atome de ^{87}Rb dans l'état $5S_{1/2}$ est à une distance z_a d'un milieu semi-infini en or. (b) Le potentiel d'interaction exact (trait noir) calculé d'après (4.74) est comparé aux interactions asymptotiques dans le régime non-retardé (cercles bleus) et dans le régime retardé (cercles rouges) également appelés régime de van der Waals (vdW) et de Casimir-Polder (CP), respectivement. Ces asymptotes ont été calculées d'après les potentiels de Lennard-Jones (4.76) et de Casimir-Polder (4.77), obtenues en considérant un milieu parfaitement conducteur (PEC). Nous indiquons également la longueur d'onde typique λ_0 de la transition atomique du rubidium (trait pointillé orange) délimitant les deux régimes asymptotiques.

Nous pouvons maintenant tracer le potentiel CP exact pour l'état 5S à proximité de la surface plane stratifiée déterminée précédemment. Le potentiel d'interaction est présenté en Fig.4.7. Nos études de convergence pour les distances considérées ici ont montré que la bande spectrale pertinente pour l'intégration numérique s'étale de 10^{10} à 10^{18} rad/s. Pour des fréquences supérieures les matériaux deviennent transparents et la polarisabilité de l'atome tend vers 0 (cf. section 4.2.5). Après évaluation numérique, les bornes de la partie imaginaire du vecteur d'onde sont fixées à 10^3 et 10^{10} m^{-1}.

Nous nous intéressons maintenant au cas où l'atome est dans l'état excité $5P_{3/2}$.

État excité

Comme nous l'avons vu dans la section 4.2, lorsque l'atome est excité, il peut émettre spontanément un photon réel, une partie dite résonante (4.50) se rajoute alors au potentiel d'interaction non-résonant. En utilisant l'expression du tenseur de Green au fréquences réelles (4.69), nous pouvons écrire la partie résonante telle que

$$\mathrm{U}_{5\mathrm{P}}^{res}(z_a) = \mathrm{U}_{5\mathrm{P}}^{res,prop}(z_a) + \mathrm{U}_{5\mathrm{P}}^{res,eva}(z_a), \tag{4.78}$$

avec

$$\mathrm{U}_{5\mathrm{P}}^{res,prop}(z_a) = \frac{\mu_0}{12\pi}\sum_{k<5\mathrm{P}}\omega_{5\mathrm{P}-k}^2|\mathbf{d}_{5\mathrm{P}-k}|^2\int_0^{\omega_{5\mathrm{P}-k}/c}dk_z\left[\mathrm{Im}\left(\mathrm{e}^{2ik_{z,0}z_a}r_s^0\right)+\left(1-2\frac{k_{z,0}^2c^2}{\omega_{5\mathrm{P}-k}^2}\right)\mathrm{Im}\left(\mathrm{e}^{2ik_{z,0}z_a}r_p^0\right)\right] \tag{4.79}$$

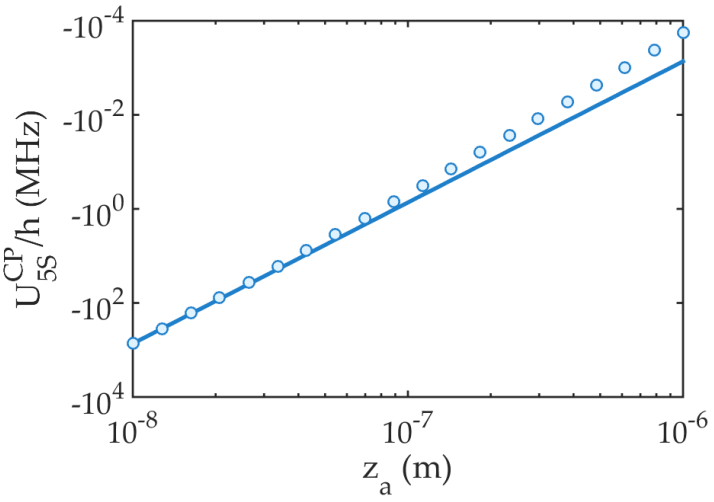


FIGURE 4.7 – **Déplacement énergétique de l'état fondamental $5S_{1/2}$ du ^{87}Rb dû à l'interaction CP entre l'atome et la surface plane stratifiée.** Le potentiel d'interaction CP est tracé en fonction de la distance atome-surface z_a. Le trait plein bleu correspond à un ajustement avec une loi en $-1/z_a^3$, qui correspond au régime non-retardé (voir section 4.1.2).

la partie qui décrit les modes propagatifs de la surface, et

$$U_{5P}^{res,eva}(z_a) - \frac{\mu_0}{12\pi}\sum_{k<5P}\omega_{5P-k}^2|\mathbf{d}_{5P-k}|^2\int_0^\infty d\kappa_{z,0}\left[\mathrm{Re}\left(e^{-2\kappa_{z,0}z_a}r_s^0\right)+\left(1+2\frac{\kappa_{z,0}^2c^2}{\omega_{5P-k}^2}\right)\mathrm{Re}\left(e^{-2\kappa_{z,0}z_a}r_p^0\right)\right] \tag{4.80}$$

la partie qui décrit les modes évanescents. Les coefficients de réflexion en amplitude de la surface en polarisations s (r_s^0) et p (r_p^0) sont calculés aux fréquences réelles, d'après les relations (4.72a) et (4.72b), respectivement.

L'interaction entre l'atome dans l'état $5P_{3/2}$ et la surface plane stratifiée est présentée en Fig.4.8, où nous avons séparé les contributions non-résonante U_{5P}^{nres} (a), résonante propagative $U_{5P}^{res,prop}$ et résonante évanescente $U_{5P}^{res,eva}$ (b). Nous rappelons que la partie non-résonante est donnée par (4.74) en substituant "5S" par "5P". Nous notons que les polarisabilités dans les états fondamental et excité sont positives en fréquences imaginaires (cf. Fig.4.3(a)). Nous reportons également la somme des contributions non-résonante et résonante qui correspond au potentiel total d'interaction de l'état excité $U_{5P}^{(CP)}$ (c). A la différence de la partie non-résonante, nous constatons que la partie résonante peut être positive pour certaines distances de séparations. De plus elle présente des oscillations avec une longueur d'onde de l'ordre de $\lambda_0/2$, correspondant aux photons réels émis par une désexcitation de l'atome. En effet, pour l'atome de ^{87}Rb, la somme dans le terme résonant (4.78) est non-nulle en raison de la transition de l'état $5P_{3/2}$ vers $5S_{1/2}$ qui peut émettre un photon spontanément. Nous avons ici $\omega_{5P-5S} \equiv \omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$, où λ_0=780.241 nm, et $|\mathbf{d}_{5P-5S}| = \langle J_n = 3/2 \,||\mathbf{d}_0||\, J_k = 1/2\rangle/2 = 2.989\, ea_0$, où nous avons utilisé la relation définie en section 4.2.4 ainsi que la valeur de l'élément réduit du dipôle donnée dans le Tableau 3.3 du Chapitre 3.

4.3.2 Surface nanostructurée à une dimension

Comme nous l'avons démontré en section 4.2, la partie non-résonante (4.52) est de la forme $U_n^{nres}(z_a) \propto \boldsymbol{\alpha}_n(i\xi)\cdot\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_A,\mathbf{r}_A,i\xi)$. Il faut donc exprimer le tenseur de Green selon la géométrie de structure considérée.

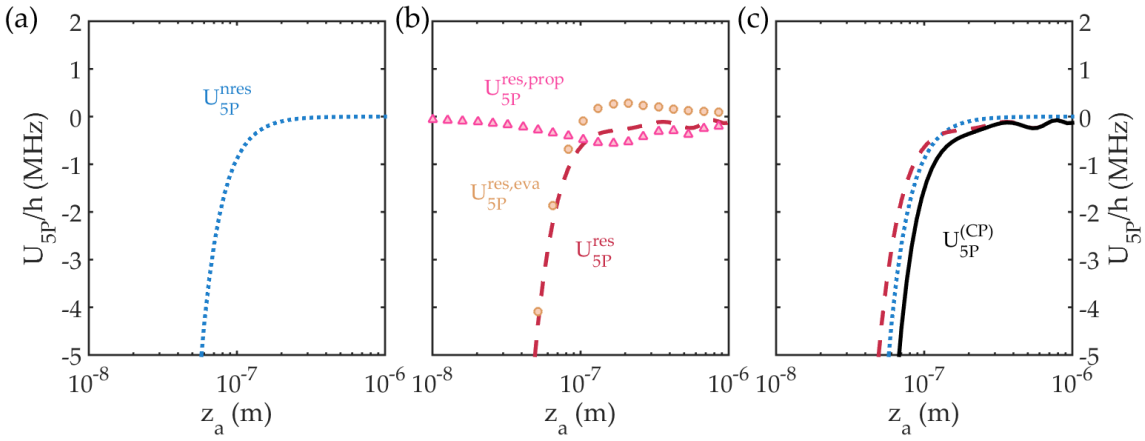


FIGURE 4.8 – **Potentiel d'interaction entre un atome ^{87}Rb dans l'état excité et la structure stratifiée multi-couches.** (a) Les photons virtuels dus aux fluctuations quantiques du vide engendrent une contribution non-résonante (pointillés bleus) tandis que (b) les photons réels émis spontanément par l'atome génèrent une contribution résonante (tirets rouges), résultant elle-même de la somme d'une partie propagative (triangles roses) et d'une partie évanescente (cercles oranges). (c) La somme des parties non-résonante et résonante génère le potentiel total d'interaction de l'état $5P_{3/2}$ (trait noir).

Tenseur de Green

Pour une surface stratifiée et structurée avec un réseau à une dimension de période ℓ, le tenseur de diffusion est donné par [Buhmann et al., 2016]

$$\mathbf{G}^{(1)}(\mathbf{r}_a,\mathbf{r}'_a,\omega)=\frac{i}{8\pi^2}\int_{-\pi/\ell}^{\pi/\ell}dk_x\sum_{m,n=-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}dk_y\sum_{\sigma,\sigma'=s,p}\frac{e^{i(k_x^m x_a-k_x^n x'_a)+ik_y(y_a-y'_a)+i(k_{z,0}^m z_a+k_{z,0}^n z'_a)}}{k_{z,0}^n}\mathbf{e}^m_{\sigma+}r^{mn}_{\sigma\sigma'}\mathbf{e}^n_{\sigma'-}, \tag{4.81}$$

où la somme porte sur la polarisation $\sigma,\sigma'=s,p$ et les intégrations sur les composantes du vecteur d'onde incident définies telles que

$$k_\parallel^m=k_x^m+k_y=k_x+m\frac{2\pi}{\ell}+k_y, \tag{4.82}$$

et

$$k_{z,j}^m=\sqrt{\varepsilon_j\omega^2/c^2-k_x^{m2}-k_y^2}. \tag{4.83}$$

Le réseau étant périodique selon (Ox), l'intégration sur k_x porte sur la première zone de Brillouin : $k_x\in[-\pi/\ell,\pi/\ell]$. Le vecteur unitaire $\mathbf{e}^n_{\sigma'-}$ décrit la propagation du champ qui se propage dans l'ordre n selon $-z$ avec une polarisation σ'. Le champ électromagnétique est ensuite diffracté par la surface dans l'ordre m avec une polarisation σ. Cette partie réfléchie qui se propage selon $+z$ est caractérisée par le vecteur unitaire de polarisation $\mathbf{e}^m_{\sigma+}$. Les vecteurs polarisation sont ici donnés par [Contreras-Reyes et al., 2010]

$$\mathbf{e}^m_{s\pm}=\frac{1}{\sqrt{k_0^2-k_y^2}}\begin{pmatrix}\mp k_{z,0}^m\\0\\k_x^m\end{pmatrix}\quad\text{et}\quad\mathbf{e}^m_{p\pm}=\frac{1}{k_0}\frac{1}{\sqrt{k_0^2-k_y^2}}\begin{pmatrix}k_x^m k_y\\k_y^2-k_0^2\\\pm k_y k_{z,0}^m\end{pmatrix}. \tag{4.84}$$

De la même façon que pour le cas stratifié multi-couches, il est nécessaire de calculer les coefficients de réflexion en amplitude $r^{mn}_{\sigma\sigma'}$ de la structure 1D, aux fréquences réelles et imaginaires. Pour cela, une solution est d'utiliser la méthode modale de Fourier (FMM pour *Fourier Modal Method* en anglais), également connue sous le nom RCWA (pour *Rigorous Coupled-Waves Analysis* en anglais). Cette méthode est fastidieuse à implémenter. Afin d'avoir une première intuition sur l'interaction CP, nous avons décidé d'utiliser une approximation que nous allons à présent détailler. Cette approximation n'est pas exacte mais possède l'avantage non seulement de simplifier les calculs, mais également de traiter toute sorte de géométrie.

Approximation *pairwise summation*

Cette approximation *PairWise Summation* (PWS) consiste à sommer toutes les interactions entre l'atome de ^{87}Rb et les molécules qui composent la structure. Au tout début de ce chapitre, nous avons vu qu'il existait une interaction entre deux atomes due aux fluctuations quantiques du vide (cf. section 4.1.1). Il est bien connu que la force de Casimir-Polder n'est pas additive, mais cela permet en outre d'obtenir assez simplement une première approximation de la force de Casimir-Polder pour une géométrie absolument quelconque.

Nous considérons une plaque en verre (SiO_2) d'épaisseur t_d et de dimensions $2d_x \times 2d_y$ dans le plan (xOy), dont la configuration est schématisée en Fig.4.9. En notant $U_{a-m}(l)$ l'interaction entre un atome de rubidium dans l'état n et une molécule de dioxyde de silicium respectivement positionnés en $\mathbf{r}_a$ et $\mathbf{r}_m$, et séparés d'une distance $l = |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_m|$, le potentiel total dans l'approximation PWS en coordonnées cartésiennes s'écrit

$$U_{n-s}^{\mathrm{PWS}}(r_a, t_d) = n_d \int_{-t_d}^{0} dz_m \int_{-d_x}^{d_x} dx_m \int_{-d_y}^{d_y} dy_m U_{n-mol}(l), \tag{4.85}$$

avec n_d le nombre de molécules par unité de volume au sein du diélectrique. La distance entre l'atome et la molécule est définie par $l = \sqrt{(x_a - x_m)^2 + (y_a - y_m)^2 + (z_a - z_m)^2}$.

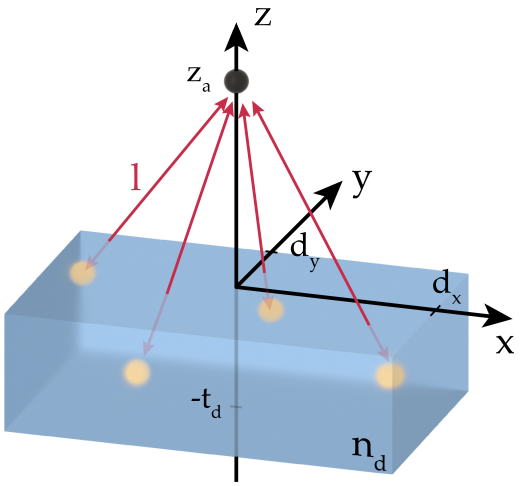


FIGURE 4.9 – **Configuration des interactions dans l'approximation PWS.** Nous considérons un atome de ^{87}Rb positionné en $\mathbf{r}_a = (x_a, y_a, z_a)$ (ici $x_a = y_a = 0$) et des molécules de SiO_2 (beige) séparés d'une distance l. Chaque interaction atome-molécule (flèches rouges) est sommée pour donner le potentiel total caractérisant l'interaction entre l'atome et la plaque diélectrique d'épaisseur t_d et de densité atomique n_d.

En effectuant un calcul similaire au cas d'un atome et d'un corps macroscopique, on peut montrer que l'interaction entre un atome et une molécule dans leurs états fondamentaux se met sous la forme [Power and Thirunamachandran, 1993, 1995]

$$U_{n-mol}(l) \equiv U_{n-mol}^{nres}(l) = -\frac{\hbar}{\pi l^6} \int_0^\infty \frac{\alpha_n(i\xi)\alpha_{SiO_2}(i\xi)}{(4\pi\varepsilon_0)^2} e^{-2\xi l/c} \left[\left(\frac{\xi l}{c}\right)^4 + 2\left(\frac{\xi l}{c}\right)^3 + 5\left(\frac{\xi l}{c}\right)^2 + 6\left(\frac{\xi l}{c}\right) + 3 \right] d\xi. \tag{4.86}$$

Nous connaissons la permittivité diélectrique du verre, ainsi nous pouvons utiliser la relation de Clausius-Mossotti qui relie la polarisabilité atomique à la permittivité du milieu par l'expression [Clausius, 1879; Mosssotti, 1850]

$$n_d \alpha_{SiO_2}(i\xi) = 3\varepsilon_0 \frac{\varepsilon_{SiO_2}(i\xi) - 1}{\varepsilon_{SiO_2}(i\xi) + 2}. \tag{4.87}$$

Cette relation est valide pour un milieu dilué. Ainsi en utilisant cette relation dans l'expression (4.86), le potentiel (4.85) devient

$$\mathrm{U}_{n-s}^{\mathrm{PWS},nres}(r_a,t_d)=-\frac{3\hbar}{16\pi^3\varepsilon_0}\int_0^\infty \alpha_n(i\xi)\frac{\varepsilon_{SiO_2}(i\xi)-1}{\varepsilon_{SiO_2}(i\xi)+2}\mathrm{I}_s^{nres}(r_a,t_d,i\xi)\,d\xi, \tag{4.88}$$

où l'intégration sur la géométrie de la surface est contenue dans le terme

$$\mathrm{I}_s^{nres}(r_a,t_d,i\xi)=\int_{-t_d}^0 dz_m\int_{-d_x}^{d_x}dx_m\int_{-d_y}^{d_y}dy_m\frac{\mathrm{e}^{-2\xi l/c}}{l^6}\left[\left(\frac{\xi l}{c}\right)^4+2\left(\frac{\xi l}{c}\right)^3+5\left(\frac{\xi l}{c}\right)^2+6\left(\frac{\xi l}{c}\right)+3\right] \tag{4.89}$$

$$\equiv 2\pi\int_{-t_d}^0 dz_m\int_0^{\mathrm{R}_d} r_m dr_m\frac{\mathrm{e}^{-2\xi l/c}}{l^6}\left[\left(\frac{\xi l}{c}\right)^4+2\left(\frac{\xi l}{c}\right)^3+5\left(\frac{\xi l}{c}\right)^2+6\left(\frac{\xi l}{c}\right)+3\right]. \tag{4.90}$$

Le passage à la seconde ligne correspond au passage en coordonnées cylindriques avec un cylindre diélectrique de rayon R_d et un atome positionné en $\mathbf{r}_a=(0,0,z_a)$. Ainsi nous notons la distance $l=\sqrt{r_m^2+(z_a-z_m)^2}$, avec $r_m^2=x_m^2+y_m^2$.

Dans un premier temps, nous allons comparer cette approximation au cas exact en calculant l'interaction entre un atome dans l'état fondamental et une couche de diélectrique d'épaisseur finie. En effet le potentiel d'interaction exact pour cette configuration a été déterminé dans la partie précédente (cf. relation (4.74)). Nous considérons un milieu de SiO_2 d'épaisseur t_d et de dimensions infinies dans le plan (xOy) soit $\mathrm{R}_d=\infty$. L'intégration sur les variables géométriques (4.90) en coordonnées cylindriques donne le résultat analytique suivant :

$$\mathrm{I}_s^{nres}(z_a,t_d,i\xi)=-\pi\frac{\xi^3}{c^3}\left[\left(1+\frac{c^2}{\xi^2z^2}+\frac{c^3}{2\xi^3z^3}\right)\mathrm{e}^{-2\xi z/c}+\frac{2\xi z}{c}\,\mathrm{ei}\left(-2\frac{\xi}{c}z\right)\right]_{z_a}^{z_a+t_d}, \tag{4.91}$$

avec la fonction exponentielle intégrale $\mathrm{ei}(x)=\int_{-\infty}^x \mathrm{e}^t t^{-1}dt$.

Nous pouvons utiliser ce résultat afin d'écrire le potentiel (4.88) pour un atome et une couche de diélectrique :

$$\mathrm{U}_{5\mathrm{S}-s}^{\mathrm{PWS}}(z_a,t_d)=\frac{3\hbar\mu_0}{16\pi^2c}\int_0^\infty \xi^3\alpha_{5\mathrm{S}}(i\xi)\frac{\varepsilon_{SiO_2}(i\xi)-1}{\varepsilon_{SiO_2}(i\xi)+2}\left[f(2\xi(z_a+t_d)/c)-f(2\xi z_a/c)\right]d\xi, \tag{4.92}$$

avec

$$f(x)=\left(1+\frac{4}{x^2}+\frac{4}{x^3}\right)\mathrm{e}^{-x}+x\,\mathrm{ei}(-x). \tag{4.93}$$

Nous considérons l'atome de ^{87}Rb dans l'état fondamental 5S à proximité de la structure plane en verre d'épaisseur t_d. Pour vérifier nos résultats, nous calculons dans un premier temps l'intégrale sur les variables spatiales (4.90) numériquement et analytiquement (relation (4.91)) afin d'étudier l'influence de la géométrie. Pour cela nous fixons une épaisseur $t_d=100$ nm en prenant 200 points pour l'intégration sur z_m (nous verrons ci-après que l'intégrale a convergé pour cette valeur). Nous calculons l'intégrale numériquement en balayant le rayon du cylindre R_d ainsi que le nombre de points sur r_m. Les résultats obtenus sont présentés en Fig.4.10 où nous traçons le rapport de l'intégrale (4.90) calculée numériquement sur l'intégrale calculée analytiquement donnée par (4.91), pour un atome positionné à $z_a=50$ nm. Nous traitons également deux configurations selon la valeur du rapport $\eta=\xi z_a/c$, dans la première $\eta=0.001$ (Fig.4.10(a)) et dans la seconde $\eta=10$ (Fig.4.10(b)). Nous constatons que le résultat converge plus rapidement avec un faible rayon et un nombre de points autour de 100-200, ce qui signifie que les interactions atome-molécule deviendront négligeables pour de plus grandes distances. En effet, la partie géométrique centrale du cylindre (autour de r_m=0) compte majoritairement dans l'intégration. Il est donc important de bien discrétiser cette région. Dans les résultats présentés ici, le nombre de points sur l'intégration est grand pour les grands rayons R_d en raison du découpage linéaire choisi dans nos intégrations numériques.

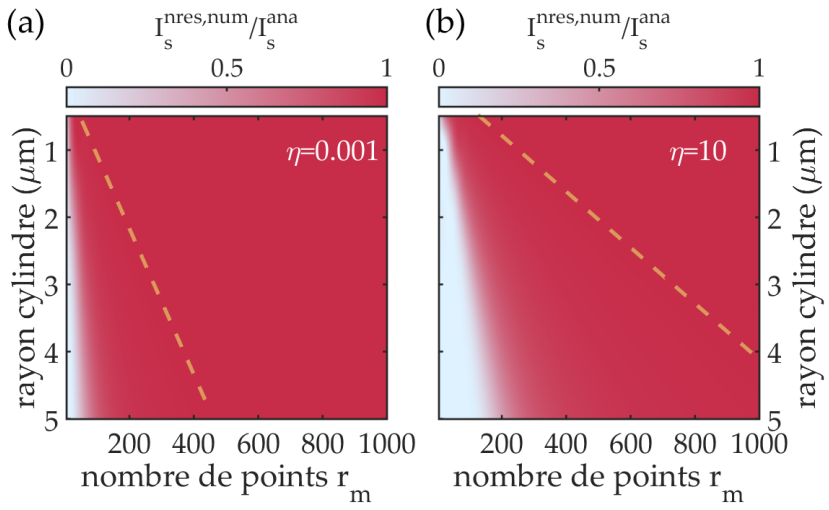


FIGURE 4.10 – **Étude de convergence de l'intégrale sur les variables géométriques I_s^{nres} résolue numériquement en fonction de l'intégration sur r_m.** Nous traçons le rapport des intégrales I_s^{nres} résolues de manière numérique (4.90) et analytique (4.91) en fonction du nombre de points et de la borne maximale R_d (rayon du cylindre diélectrique) de l'intégration sur r_m, pour deux valeurs du paramètre η (cf. texte) : (a) η = 0.001 et (b) η = 10. A droite des traits pointillés orange correspondent toutes les valeurs pour lesquelles le ratio est inférieur à 1%.

Nous étudions également la convergence en fonction du nombre de points pour z_m. Nous traçons en Fig.4.11 l'erreur relative commise en calculant l'intégrale (4.90) numériquement par rapport à sa résolution analytique. Les courbes correspondent à différentes épaisseurs t_d pour le cylindre diélectrique. Nous prenons ici η = 1 avec z_a = 50 nm en fixant l'intégration sur r_m à 300 points pour un rayon R_d = 1 µm (voir optimisation ci-dessus). Les résultats convergent assez rapidement et permettent d'atteindre des erreurs en-dessous du pour cent (trait pointillé noir) avec quelques dizaines de points sur z_m pour des épaisseurs de cylindre de l'ordre du µm, voire une centaine lorsque celui-ci devient de l'ordre de quelques dizaines de µm d'épaisseur.

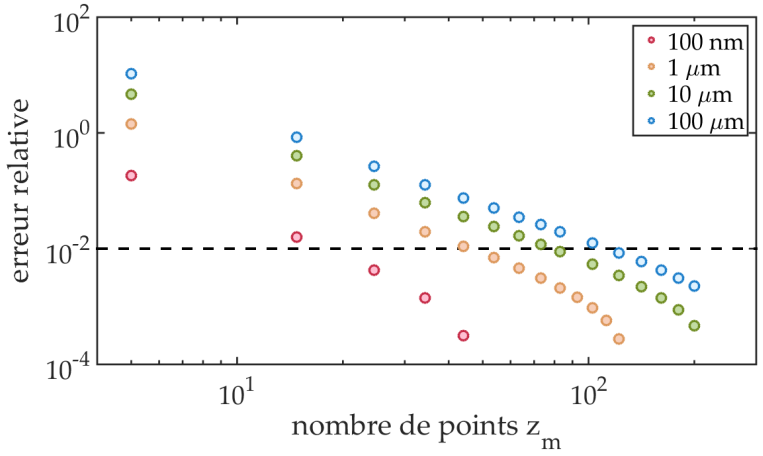


FIGURE 4.11 – **Erreur relative commise dans l'approximation PWS en fonction du nombre de points et des bornes pour l'intégration sur z_m.** L'erreur relative commise en calculant le potentiel d'interaction entre un atome dans l'état fondamental et une couche diélectrique plane, d'après (4.92), est tracée en fonction du nombre de points pour l'intégration sur z_m. Le potentiel exact est calculé d'après la relation (4.74). Nous présentons plusieurs configurations correspondant à différentes épaisseurs de verre t_d : 100 nm (rouge), 1 µm (orange), 10 µm (vert) et 100 µm (bleu). La ligne pointillée noire correspond à une erreur de 1%, critère que nous nous fixons sur les calculs théoriques.

En Fig.4.12, nous comparons le potentiel d'interaction dans l'approximation PWS (4.92) avec le potentiel exact (4.74) en traçant le rapport du premier sur le second, pour différentes épaisseurs de diélectrique. Proche de la structure (z_a < 100 nm) le potentiel d'interaction dans l'approximation PWS est sous-estimé. Lorsque la distance z_a augmente le potentiel approché se rapproche de la valeur exacte, à l'exception de la surface d'épaisseur 500 nm (rouge) dont l'erreur reste à peu près constante sur cette gamme de distance. Nous concluons que l'approximation PWS est davantage précise pour des milieux de faibles épaisseurs. Cela pourrait être la conséquence de l'écrantage des champs électromagnétiques par exemple, non pris en compte par cette approximation.

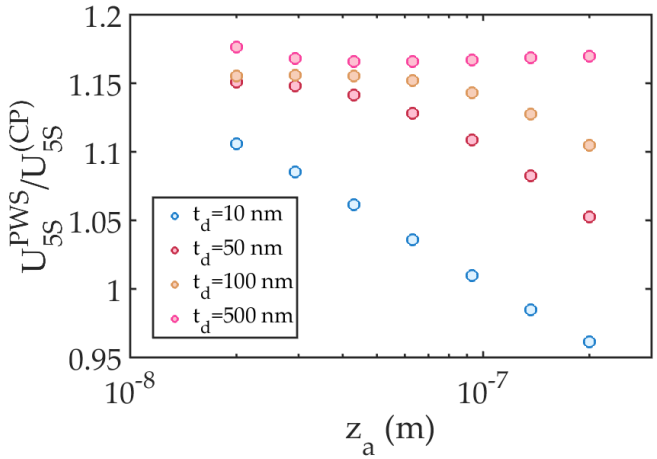


FIGURE 4.12 – **Interaction entre un atome de ^{87}Rb et une couche de diélectrique : rapport des potentiels calculés dans l'approximation PWS et de manière exacte.** On considère un atome dans l'état fondamental 5S et une couche en verre (SiO_2) d'épaisseur t_d. Le ratio du potentiel PWS (4.92) sur le potentiel exact (4.74) est tracé en fonction de la position atomique z_a pour différentes épaisseurs de diélectrique. Dans ces simulations nous prenons $R_d = 2.2$ µm pour $N_{rm} = 3500$ points et $N_{zm} = 190$ points.

Nous pouvons également étudier la configuration où l'atome est dans son état excité 5P. Le potentiel d'interaction entre l'atome et la molécule est alors donné par

$$U_{5P-mol}(l) = U_{5P-mol}^{nres}(l) + U_{5P-mol}^{res}(l), \tag{4.94}$$

où $U_{5P-mol}^{nres}(l)$ est donné par (4.86) et la partie résonante par [Power and Thirunamachandran, 1993, 1995]

$$U_{5P-mol}^{res}(l) = -\frac{1}{8\pi\varepsilon_0 l^6}\sum_{k<n}|\mathbf{d}_{5P-k}|^2\,\frac{\alpha_{SiO_2}(\omega_{nk})}{4\pi\varepsilon_0}\,g(l\omega_{nk}/c), \tag{4.95}$$

avec

$$g(x) = \left(3-5x^2+x^4\right)\cos(2x) + \left(6x-2x^3\right)\sin(2x). \tag{4.96}$$

D'après (4.88) et (4.95), le potentiel total (4.85) s'écrit alors

$$\begin{aligned} U_{5P-s}^{PWS}(z_a,t_d) &= U_{5P-s}^{PWS,nres}(z_a,t_d) + U_{5P-s}^{PWS,res}(z_a,t_d), \\ &= -\frac{3}{16\pi^3\varepsilon_0}\left[\hbar\int_0^\infty \alpha_n(i\xi)\frac{\varepsilon_{SiO_2}(i\xi)-1}{\varepsilon_{SiO_2}(i\xi)+2}I_s^{nres}(z_a,t_d,i\xi)\,d\xi\right. \\ &\qquad \left. +\frac{\pi}{2}\sum_{k<n}|\mathbf{d}_{5P-k}|^2\,\frac{\varepsilon_{SiO_2}(\omega_{nk})-1}{\varepsilon_{SiO_2}(\omega_{nk})+2}I_s^{res}(z_a,t_d,\omega_{nk})\right], \end{aligned} \tag{4.97}$$

où nous avons utilisé la relation de Clausius-Mossotti (4.87) afin de réécrire la polarisabilité du dioxyde de silicium en terme de la permittivité du milieu diélectrique. Dans la partie

résonante, nous définissons également l'intégration sur la géométrie du diélectrique par le terme

$$\mathrm{I}_s^{res}(z_a, t_d, \omega_{nk}) = 2\pi \int_{-t_d}^{0} dz_m \int_0^{\infty} dr_m \frac{r_m}{l^6} g(l\omega_{nk}/c), \tag{4.98}$$

où nous sommes passés en coordonnées cylindriques.

Pour une couche de diélectrique d'épaisseur t_d l'intégration sur les variables géométriques (4.98) ne peut être résolue analytiquement. Ainsi, nous calculons numériquement ce terme afin de déterminer le potentiel CP de l'état 5P dans l'approximation PWS (4.97). Pour cela nous étudions la convergence de l'interaction en fonction du nombre de points et des bornes d'intégrations. Nous présentons par exemple en Fig.4.13 l'évolution du rapport du potentiel d'interaction (4.97) et du potentiel exact donné par la somme des termes (4.74) (5S→5P) et (4.78) en fonction du nombre de points pour l'intégration sur r_m. Nous avons séparé ici les contributions non-résonante et résonante. Dans ces calculs l'atome est positionné à $z_a = 50$ nm d'une couche en SiO_2 d'épaisseur $t_d = 10$ nm. Concernant les intégrations sur z_m et ξ nous avons respectivement pris un nombre de points égal à 10 et 80. Nous constatons que les calculs convergent assez vite et ne nécessitent pas de définir un grand rayon pour le cylindre. Un rayon $\mathrm{R}_d = 1$ µm avec 1000 points pour l'intégration suffisent et permettent d'estimer l'erreur commise avec cette approximation, soit ici $\mathrm{U}_{5\mathrm{P}}^{\mathrm{PWS}}/\mathrm{U}_{5\mathrm{P}}^{\mathrm{CP}} \simeq 0.79$.

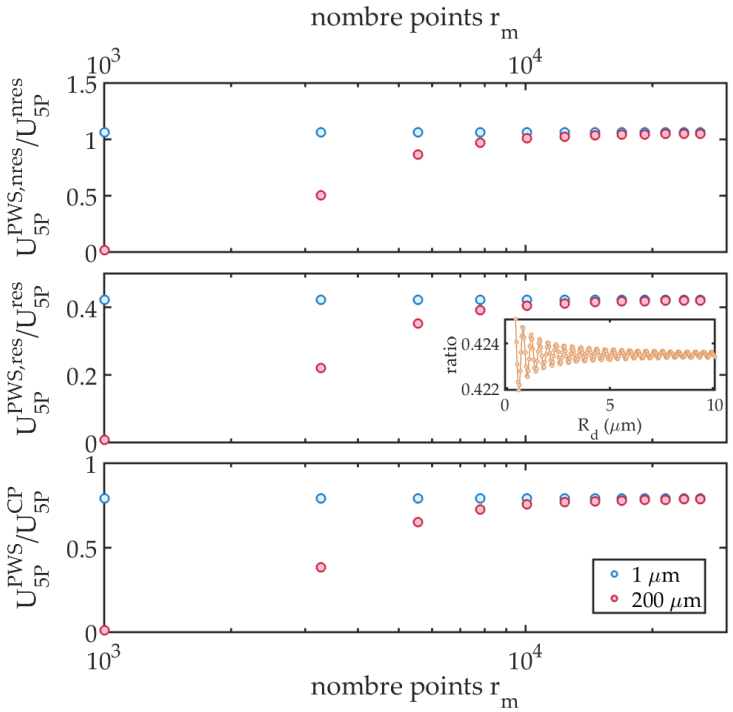


FIGURE 4.13 – **Convergence du potentiel CP d'un atome excité dans l'approximation PWS.** Les parties non-résonante $\mathrm{U}_{5\mathrm{P}}^{\mathrm{PWS},nres}$ (haut) et résonante $\mathrm{U}_{5\mathrm{P}}^{\mathrm{PWS},res}$ (milieu) ainsi que le potentiel total $\mathrm{U}_{5\mathrm{P}}^{\mathrm{PWS}} = \mathrm{U}_{5\mathrm{P}}^{\mathrm{PWS},nres} + \mathrm{U}_{5\mathrm{P}}^{\mathrm{PWS},nres}$ (bas) calculés dans l'approximation PWS sont présentés en fonction du nombre de points sur l'intégration r_m pour deux rayons de cylindres $\mathrm{R}_d = 1$ µm (bleu) et $\mathrm{R}_d = 200$ µm (rouge). Les potentiels sont normalisés avec le potentiel calculé de manière exact. En *inset* de la partie résonante (milieu) nous présentons la convergence du ratio $\mathrm{U}_{5\mathrm{P}}^{\mathrm{PWS},res}/\mathrm{U}_{5\mathrm{P}}^{res}$ en fonction du rayon du cylindre diélectrique R_d défini dans l'intégration sur la géométrie du cylindre (cf. (4.90)). La partie non-résonante converge en oscillant à une période égale à $\lambda_0 = 780$ nm en raison des possibles photons réels émis spontanément.

Dans cette approximation les interactions à plusieurs corps ne sont pas prises en compte. Par exemple, la présence d'une ou plusieurs molécules à proximité de la molécule considérée dans le calcul de l'interaction avec l'atome modifie localement le champ électromagnétique, entraînant la modification de l'interaction CP. De plus, dans le cadre d'une surface

structurée, cette approximation ne prend pas en compte les modes du réseau. Cette méthode, appropriée aux milieux faiblement dilués, donne une première estimation des potentiels d'interaction. Néanmoins, étant donné que nous souhaitons créer des potentiels périodiques, nous avons décidé de mettre en place des méthodes de type modal qui pourront éventuellement rendre compte d'effets délocalisés propres aux modes de résonance d'une nanostructure. En outre, dans notre méthode, la modulation du potentiel CP de l'état fondamental crée le réseau transverse et nécessite par conséquent une connaissance précise de cette énergie d'interaction.

Solution exacte : Méthode Modale de Fourier (FMM)

Comme présenté dans la relation (4.81), pour mettre en place une méthode numérique exacte, il est nécessaire de connaître la réponse électromagnétique exacte de la structure *via* les coefficients de réflexion en amplitude du réseau. C'est le calcul de ces coefficients que nous allons détailler à présent, afin d'obtenir le potentiel exact caractérisant l'interaction entre un atome de ^{87}Rb et la surface stratifiée et structurée à 1D (cf. optimisation du chapitre précédent). Pour cela nous utilisons la FMM (ou RCWA) que nous présentons ici, en suivant le formalisme décrit initialement dans [Moharam et al., 1995a] puis repris par exemple dans [Guérout et al., 2013]. Elle permet de prendre en compte les modes de la structure contrairement à l'approximation PWS. Cette méthode se décompose en 3 étapes : premièrement nous écrivons les équations de Maxwell dans les différentes régions de l'espace (région(s) homogène(s) et réseau(x)), secondement nous faisons correspondre les champs dans ces régions aux différentes interfaces (conditions aux limites), enfin nous assemblons la matrice de diffusion qui contient les coefficients de réflexion.

La configuration du réseau est schématisée en Fig.4.14, où nous notons ℓ la période, w_d la largeur des arêtes et t_d la hauteur du réseau. Nous considérons une onde incidente avec un angle θ dont la propagation est décrite par le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ dont les composantes sont définies par les relations (4.82) et (4.83), avec $k_x = k_0 n_\mathrm{I} \sin\theta\cos\Phi$ et $k_y = k_0 n_\mathrm{I} \sin\theta\sin\Phi$.

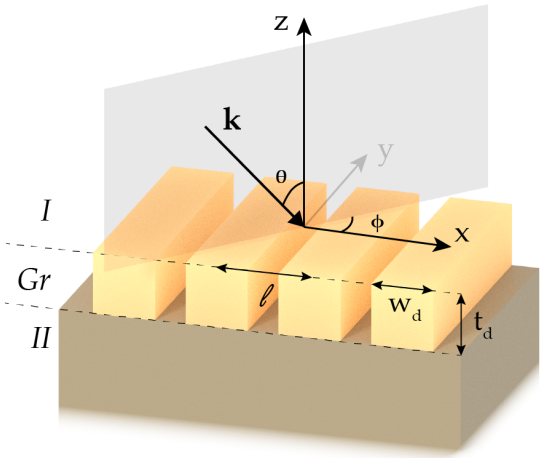


FIGURE 4.14 – **Configuration du réseau à une dimension pour le calcul des coefficients de réflexion en amplitude.** On considère un réseau (région G*r*) d'épaisseur t_d, de période ℓ et de largeur de fente w_d entouré par deux régions homogènes I et II. L'onde incidente avec un angle θ est contenue dans le plan qui fait un angle Φ avec l'axe (Ox).

■ **Écriture des champs électrique et magnétique**

Dans un premier temps nous écrivons les champs dans les différentes régions notées I, II et G*r* (voir Fig.4.14). Le problème étant invariant en temps et dans la direction y, nous

omettons le facteur $e^{i(k_y y-\omega t)}$ dans les calculs suivants.

▷ ***Régions homogènes (I & II)***

Dans ces parties de l'espace, nous suivons une décomposition de Rayleigh. Ainsi pour un champ incident dans l'ordre n et une polarisation σ décrit par une amplitude I_n^σ, nous pouvons mettre les composantes des champs électrique et magnétique sous la forme

$$E_y^I(x,z) = I_n^s e^{i\left(k_x^n x - k_{z,j}^n z\right)} + \sum_m R_{mn}^s e^{i\left(k_x^m x + k_{z,I}^m z\right)}, \tag{4.99a}$$

$$H_y^I(x,z) = I_n^p e^{i\left(k_x^n x - k_{z,I}^n z\right)} + \sum_m R_{mn}^p e^{i\left(k_x^m x + k_{z,I}^m z\right)}, \tag{4.99b}$$

où R_{mn}^σ représente l'amplitude réfléchie en polarisation σ. De la même manière, dans la région II nous avons

$$E_y^{II}(x,z) = \sum_m T_{mn}^s e^{i\left[k_x^m x - k_{z,II}^m (z+t_d)\right]}, \tag{4.100a}$$

$$H_y^{II}(x,z) = \sum_m T_{mn}^p e^{i\left[k_x^m x - k_{z,II}^m (z+t_d)\right]}, \tag{4.100b}$$

avec l'amplitude des champs transmis T_{mn}^σ.

Les équations de Maxwell (4.7c) et (4.7d) donnent

$$E_x^j(x,z) = \frac{ik_y}{\varepsilon_j\omega^2/c^2 - k_y^2}\partial_x E_y^j(x,z) + \frac{i\omega/c}{\varepsilon_j\omega^2/c^2 - k_y^2}\partial_z H_y^j(x,z), \tag{4.101a}$$

$$H_x^j(x,z) = \frac{ik_y}{\varepsilon_j\omega^2/c^2 - k_y^2}\partial_x H_y^j(x,z) - \frac{i\varepsilon_j\omega/c}{\varepsilon_j\omega^2/c^2 - k_y^2}\partial_z E_y^j(x,z). \tag{4.101b}$$

▷ ***Région périodique (***Gr***)***

Dans la région périodique du réseau, les champs ainsi que la permittivité $\varepsilon_{Gr}(x)$ et son inverse $\chi_{Gr}(x) = 1/\varepsilon_{Gr}(x)$ se décomposent en série de Fourier :

$$E_x^{Gr}(x,z) = \sum_m e_{x,Gr}^m(z) e^{ik_x^m x}, \tag{4.102a}$$

$$E_y^{Gr}(x,z) = \sum_m e_{y,Gr}^m(z) e^{ik_x^m x}, \tag{4.102b}$$

$$H_x^{Gr}(x,z) = \sum_m h_{x,Gr}^m(z) e^{ik_x^m x}, \tag{4.102c}$$

$$H_y^{Gr}(x,z) = \sum_m h_{y,Gr}^m(z) e^{ik_x^m x}, \tag{4.102d}$$

$$\varepsilon_{Gr}(x) = \sum_m \varepsilon_{Gr}^m e^{im2\pi x/\ell}, \tag{4.102e}$$

$$\chi_{Gr}(x) = \sum_m \chi_{Gr}^m e^{im2\pi x/\ell}, \tag{4.102f}$$

où nous notons $e_{x,Gr}^m$ les composantes de Fourier du vecteur $\mathbf{e}_x^{Gr} = \left[e_{x,Gr}^{-n_h}, e_{x,Gr}^{-n_h+1}, ..., e_{x,Gr}^0, ..., e_{x,Gr}^{n_h-1}, e_{x,Gr}^{n_h}\right]$, avec $n_h = (N_h - 1)/2$, N_h étant le nombre d'harmoniques.

Les équations de Maxwell rotationnelles (4.101) dans la région périodique peuvent se mettre sous la forme

$$\partial_z \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x^{Gr} \\ \mathbf{e}_y^{Gr} \\ \mathbf{h}_x^{Gr} \\ \mathbf{h}_y^{Gr} \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x^{Gr} \\ \mathbf{e}_y^{Gr} \\ \mathbf{h}_x^{Gr} \\ \mathbf{h}_y^{Gr} \end{pmatrix}, \tag{4.103}$$

avec

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{M}_e \\ \mathbf{M}_h & \mathbf{0} \end{pmatrix} = i\frac{1}{k_0}\begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_x\varepsilon_{Gr}^{-1}\mathbf{K}_y & \mathbb{1}k_0^2 - \mathbf{K}_x\varepsilon_{Gr}^{-1}\mathbf{K}_x \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_y\varepsilon_{Gr}^{-1}\mathbf{K}_y - \mathbb{1}k_0^2 & -\mathbf{K}_y\varepsilon_{Gr}^{-1}\mathbf{K}_x \\ -\mathbf{K}_y\mathbf{K}_x & \mathbf{K}_x^2 - k_0^2\varepsilon_{Gr} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ k_0^2\chi_{Gr}^{-1} - \mathbf{K}_y^2 & \mathbf{K}_y\mathbf{K}_x & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (4.104)$$

où nous notons $\mathbf{K}_x = \mathrm{diag}[k_x^m]$, $\mathbf{K}_y = \mathbb{1}k_y$. L'identité $\mathbb{1}$ est ici une matrice de taille $N_h \times N_h$ tandis que ε_{Gr} et χ_{Gr} sont les matrices de Toeplitz définies par

$$\varepsilon_{Gr} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{Gr}^{0} & \varepsilon_{Gr}^{1} & \dots & \varepsilon_{Gr}^{2n_h} \\ \varepsilon_{Gr}^{-1} & \varepsilon_{Gr}^{0} & \dots & \varepsilon_{Gr}^{2n_h-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varepsilon_{Gr}^{-2n_h} & \varepsilon_{Gr}^{-2n_h+1} & \dots & \varepsilon_{Gr}^{0} \end{pmatrix}. \quad (4.105)$$

Par ailleurs, dans la matrice $\mathbf{M}_h$ nous suivons la règle de factorisation de Li [Li, 1996] en remplaçant le terme ε_{Gr} par χ_{Gr}^{-1} pour une meilleure stabilité numérique [Granet and Guizal, 1996; Lalanne and Morris, 1996].

L'équation (4.103) peut se réécrire comme une équation du type Helmholtz décrivant la propagation des champs électriques :

$$\partial_z^2\begin{pmatrix} \mathbf{e}_x^{Gr} \\ \mathbf{e}_y^{Gr} \end{pmatrix} = \mathbf{M}^s\begin{pmatrix} \mathbf{e}_x^{Gr} \\ \mathbf{e}_y^{Gr} \end{pmatrix}, \quad (4.106)$$

avec $\mathbf{M}^s = \mathbf{M}_e\mathbf{M}_h = \mathbf{Q}\Lambda\mathbf{Q}^{-1}$. Les matrices $\mathbf{Q}$ et Λ correspondent aux vecteurs et valeurs propres de $\mathbf{M}^s$, respectivement. La solution à l'équation (4.106) peut ainsi se mettre sous la forme

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}_x^{Gr}(z) \\ \mathbf{e}_y^{Gr}(z) \end{pmatrix} = e^{\sqrt{\mathbf{M}^s}z}\mathbf{c}^+ + e^{-\sqrt{\mathbf{M}^s}z}\mathbf{c}^- = \mathbf{Q}e^{\sqrt{\Lambda}z}\mathbf{c}^+ + \mathbf{Q}e^{-\sqrt{\Lambda}(z+t_d)}\mathbf{c}^-, \quad (4.107)$$

où $\mathbf{c}^\pm$ décrivent les modes du réseau dans lesquels les champs se propagent, selon $\pm z$. Ce sont ces derniers que nous cherchons à déterminer. L'élément $\mathbf{Q}^{-1}$ a par ailleurs été inclus dans les modes $\mathbf{c}^\pm$ et les exponentielles sont définies de manière à éviter toute divergence en $z = -t_d$ [Moharam et al., 1995a]. Quant à l'équation de la propagation des champs magnétiques elle est donnée par

$$\begin{pmatrix} \mathbf{h}_x^{Gr}(z) \\ \mathbf{h}_y^{Gr}(z) \end{pmatrix} = \mathrm{M}_e^{-1}\partial_z\begin{pmatrix} \mathbf{e}_x^{Gr}(z) \\ \mathbf{e}_y^{Gr}(z) \end{pmatrix} = \mathrm{M}_e^{-1}\mathbf{Q}\sqrt{\Lambda}e^{\sqrt{\Lambda}z}\mathbf{c}^+ - \mathrm{M}_e^{-1}\mathbf{Q}\sqrt{\Lambda}e^{-\sqrt{\Lambda}(z+t_d)}\mathbf{c}^-. \quad (4.108)$$

A présent nous pouvons faire correspondre les champs aux interfaces $z = 0$ et $z = -t_d$.

■ Conditions aux limites

▷ *En z=0*

A l'interface $z = 0$, en utilisant les expressions des composantes (4.99), (4.101a), (4.102a) et (4.102b), nous avons

$$\begin{pmatrix} \mathrm{E}_x^{Gr} \\ \mathrm{E}_y^{Gr} \end{pmatrix}\Big|_{z=0} = \begin{pmatrix} \mathrm{E}_x^{I} \\ \mathrm{E}_y^{I} \end{pmatrix}\Big|_{z=0}$$
$$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{e}_x^{Gr}(0) \\ \mathbf{e}_y^{Gr}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{k_y\mathbf{K}_x}{\varepsilon_1 k_0^2 - k_y^2}(\mathbf{I}^s + \mathbf{R}^s) + \frac{k_0\mathbf{K}_{z,I}}{\varepsilon_1 k_0^2 - k_y^2}(\mathbf{I}^p - \mathbf{R}^p) \\ \mathbf{I}^s + \mathbf{R}^s \end{pmatrix}, \quad (4.109)$$

tandis qu'avec les expressions (4.100), (4.101b), (4.102c) et (4.102d), les conditions aux limites pour le champ magnétique donnent

$$\left.\begin{pmatrix} \mathrm{H}_x^{Gr} \\ \mathrm{H}_y^{Gr} \end{pmatrix}\right|_{z=0} = \left.\begin{pmatrix} \mathrm{H}_x^{\mathrm{I}} \\ \mathrm{H}_y^{\mathrm{I}} \end{pmatrix}\right|_{z=0}$$
$$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{h}_x^{Gr}(0) \\ \mathbf{h}_y^{Gr}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\varepsilon_\mathrm{I} k_0 \mathbf{K}_{z,\mathrm{I}}}{\varepsilon_\mathrm{I} k_0^2 - k_y^2}(\mathbf{I}^s - \mathbf{R}^s) - \frac{k_y \mathbf{K}_x}{\varepsilon_\mathrm{I} k_0^2 - k_y^2}(\mathbf{I}^p + \mathbf{R}^p) \\ \mathbf{I}^p + \mathbf{R}^p \end{pmatrix}. \tag{4.110}$$

Nous avons posé ici $\mathbf{K}_{z,j} = \mathrm{diag}\left[k_{z,j}^m\right]$. De plus, comme nous l'avons précédemment mentionné, les polarisations s (resp. p) correspondent à $\mathrm{H}_y = 0$ (resp. $\mathrm{E}_y = 0$). Par conséquent nous imposons $\mathbf{I}^s = \mathbb{1}$ et $\mathbf{I}^p = \mathbf{0}$ pour des ondes incidentes en polarisation s, et inversement pour les ondes en polarisation p.

Ces systèmes d'équations (4.109) et (4.110) peuvent être mis sous une forme plus compact et plus lisible, de manière identique à [Guérout et al., 2013] :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}_x^{Gr}(0) \\ \mathbf{e}_y^{Gr}(0) \\ \mathbf{h}_x^{Gr}(0) \\ \mathbf{h}_y^{Gr}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{i}^{ss} & \mathbf{i}^{sp} \\ \mathbf{i}^{ps} & \mathbf{i}^{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^s \\ \mathbf{I}^p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{r}^s \\ \mathbf{r}^p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{R}^s \\ \mathbf{R}^p \end{pmatrix}, \tag{4.111}$$

avec

$$\begin{pmatrix} \mathbf{i}^{ss} & \mathbf{i}^{sp} \\ \mathbf{i}^{ps} & \mathbf{i}^{pp} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{k_y \mathbf{K}_x}{\varepsilon_\mathrm{I} k_0^2 - k_y^2} & \frac{k_0 \mathbf{K}_{z,\mathrm{I}}}{\varepsilon_\mathrm{I} k_0^2 - k_y^2} \\ \mathbb{1} & \mathbf{0} \\ -\frac{k_0 \varepsilon_\mathrm{I} \mathbf{K}_{z,\mathrm{I}}}{\varepsilon_\mathrm{I} k_0^2 - k_y^2} & -\frac{k_y \mathbf{K}_x}{\varepsilon_\mathrm{I} k_0^2 - k_y^2} \\ \mathbf{0} & \mathbb{1} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} \mathbf{r}^s \\ \mathbf{r}^p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{k_y \mathbf{K}_x}{\varepsilon_\mathrm{I} k_0^2 - k_y^2} & -\frac{k_0 \mathbf{K}_{z,\mathrm{I}}}{\varepsilon_\mathrm{I} k_0^2 - k_y^2} \\ \mathbb{1} & \mathbf{0} \\ \frac{k_0 \varepsilon_\mathrm{I} \mathbf{K}_{z,\mathrm{I}}}{\varepsilon_\mathrm{I} k_0^2 - k_y^2} & -\frac{k_y \mathbf{K}_x}{\varepsilon_\mathrm{I} k_0^2 - k_y^2} \\ \mathbf{0} & \mathbb{1} \end{pmatrix}. \tag{4.112}$$

Le premier terme à droite de l'égalité (4.111) caractérise les champs incidents tandis que le second décrit les champs réfléchis par le réseau.

▷ ***En z=−t_d***

De la même manière, la correspondance des composantes électriques et magnétiques des régions Gr et II nous permet d'écrire le système caractérisant les champs transmis :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}_x^{Gr}(-t_d) \\ \mathbf{e}_y^{Gr}(-t_d) \\ \mathbf{h}_x^{Gr}(-t_d) \\ \mathbf{h}_y^{Gr}(-t_d) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{t}^s \\ \mathbf{t}^p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{T}^s \\ \mathbf{T}^p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{k_y \mathbf{K}_x}{\varepsilon_\mathrm{II} k_0^2 - k_y^2} & \frac{k_0 \mathbf{K}_{z,\mathrm{II}}}{\varepsilon_\mathrm{II} k_0^2 - k_y^2} \\ \mathbb{1} & \mathbf{0} \\ -\frac{k_0 \varepsilon_\mathrm{II} \mathbf{K}_{z,\mathrm{II}}}{\varepsilon_\mathrm{II} k_0^2 - k_y^2} & -\frac{k_y \mathbf{K}_x}{\varepsilon_\mathrm{II} k_0^2 - k_y^2} \\ \mathbf{0} & \mathbb{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{T}^s \\ \mathbf{T}^p \end{pmatrix}. \tag{4.113}$$

■ Assemblage de la matrice de diffusion

L'idée est maintenant de faire correspondre les expressions des composantes de champs aux interfaces (4.111) et (4.113) avec les solutions (4.107) et (4.108). A $z = 0$ nous avons

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q} & \mathbf{Q}\mathrm{e}^{-\sqrt{\Lambda} t_d} \\ \mathbf{W} & -\mathbf{W}\mathrm{e}^{-\sqrt{\Lambda} t_d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}^+ \\ \mathbf{c}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{i}^{ss} & \mathbf{i}^{sp} \\ \mathbf{i}^{ps} & \mathbf{i}^{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^s \\ \mathbf{I}^p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{r}^s \\ \mathbf{r}^p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{R}^s \\ \mathbf{R}^p \end{pmatrix}, \tag{4.114}$$

où nous posons $\mathbf{W} = \mathrm{M}_e^{-1} \mathbf{Q} \sqrt{\Lambda}$. Alors qu'en $z = -t_d$, l'égalité donne

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}\mathrm{e}^{-\sqrt{\Lambda} t_d} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{W}\mathrm{e}^{-\sqrt{\Lambda} t_d} & -\mathbf{W} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}^+ \\ \mathbf{c}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{t}^s \\ \mathbf{t}^p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{T}^s \\ \mathbf{T}^p \end{pmatrix}. \tag{4.115}$$

Ensuite nous éliminons les coefficients $\mathbf{R}^s$, $\mathbf{R}^p$, $\mathbf{T}^s$ et $\mathbf{T}^p$ pour déterminer les modes $\mathbf{c}^\pm$, permettant une résolution numériquement plus stable [Moharam et al., 1995a]. En suivant ce procédé, nous obtenons le système à résoudre suivant :

$$\begin{pmatrix} \left(\mathbf{Q}-\mathbf{t}^s\mathbf{t}^{p-1}\mathbf{W}\right)\mathrm{e}^{-\sqrt{\Lambda}t_d} & \mathbf{Q}+\mathbf{t}^s\mathbf{t}^{p-1}\mathbf{W} \\ \mathbf{Q}-\mathbf{r}^s\mathbf{r}^{p-1}\mathbf{W} & \left(\mathbf{Q}+\mathbf{r}^s\mathbf{r}^{p-1}\mathbf{W}\right)\mathrm{e}^{-\sqrt{\Lambda}t_d} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{c}^+ \\ \mathbf{c}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \left(\mathbf{i}_{ss}-\mathbf{r}^s\mathbf{r}^{p-1}\mathbf{i}_{ps} \quad \mathbf{i}_{sp}-\mathbf{r}^s\mathbf{r}^{p-1}\mathbf{i}_{pp}\right)\begin{pmatrix} \mathbf{I}^s \\ \mathbf{I}^p \end{pmatrix} \end{pmatrix}. \tag{4.116}$$

Une fois les modes $\mathbf{c}^\pm$ déterminés en résolvant ce système, nous pouvons utiliser la relation (4.114) afin d'en déduire les coefficients de réflexion en amplitude :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{R}^s \\ \mathbf{R}^p \end{pmatrix} = \mathbf{r}^{p-1}\left(\mathbf{W}\left(\mathbf{c}^+ - \mathrm{e}^{-\sqrt{\Lambda}t_d}\mathbf{c}^-\right) - \begin{pmatrix} \mathbf{i}^{ps} & \mathbf{i}^{pp} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{I}^s \\ \mathbf{I}^p \end{pmatrix} \right). \tag{4.117}$$

Nous résolvons le système (4.116) pour les deux configurations de polarisation (ondes incidentes avec $\sigma = s$ et $\sigma = p$), cela nous permet ainsi d'avoir la matrice complète de réflexion donnée par

$$\mathbf{R}^{\mathrm{Gr}} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}^{ss} & \mathbf{R}^{sp} \\ \mathbf{R}^{ps} & \mathbf{R}^{pp} \end{pmatrix}, \tag{4.118}$$

où le terme $\mathbf{R}^{\sigma\sigma'}$ décrit la réflexion d'une onde incidente en polarisation σ' et réfléchie en σ. Celle-ci est une matrice de taille $\mathrm{N}_h \times \mathrm{N}_h$ dont chaque élément $\mathbf{r}^{mn}_{\sigma\sigma'}$ caractérise la quantité de lumière réfléchie dans l'ordre m pour un ordre incident n. Nous nous intéressons uniquement à la matrice caractérisant la réflexion car nous avons seulement besoin des coefficients de réflexion en amplitude, mais la matrice de transmission peut s'obtenir de la même manière, à partir de (4.115).

État fondamental

Nous avons à présent les coefficients de réflexion en amplitude du réseau 1D qui nous permettent de calculer le tenseur (4.81). En insérant l'expression de ce dernier dans (4.52) nous obtenons le potentiel non-résonant de l'état 5S :

$$\begin{aligned} \mathrm{U}^{(\mathrm{CP})}_{5\mathrm{S}}(\mathbf{r}_a) = \frac{\hbar\mu_0}{16\pi^3}\int_0^\infty \xi^2 d\xi \alpha_{5\mathrm{S}}(i\xi)\int_{-\pi/\ell}^{\pi/\ell} dk_x \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{i(m-n)2\pi x_a/\ell} \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \frac{\mathrm{e}^{-(\kappa^m_{z,0}+\kappa^n_{z,0})z_a}}{\kappa^n_{z,0}} \sum_{\sigma,\sigma'=s,p} r^{mn}_{\sigma\sigma'}\mathbf{e}^m_{\sigma+}\mathbf{e}^n_{\sigma'-}, \end{aligned} \tag{4.119}$$

où nous rappelons que $k^n_{z,0} = i\kappa^n_{z,0}$.

■ Validation des résultats : cas d'un réseau en or

Afin de valider nos résultats, nous comparons le potentiel exact obtenu à partir de (4.119) avec les résultats théoriques de [Buhmann et al., 2016]. Dans ce papier ils calculent l'interaction entre un atome de ^{87}Rb dans son état fondamental et un réseau en or de période $\ell = 4$ µm avec une largeur d'arête $w_d = 2$ µm et une hauteur $t_m = 20$ nm. De plus le réseau est entouré de vide, ainsi nous prenons $\varepsilon_{\mathrm{I}} = \varepsilon_{\mathrm{II}} = 1$. La comparaison est présentée en Fig.4.15, où nous traçons une coupe du potentiel $\mathrm{U}^{(\mathrm{CP})}_{5\mathrm{S}}$ en fonction de la position longitudinale x_a pour une position transverse $z_a = 700$ nm. En considérant une base linéaire (x, y, z) nous avons les différentes composantes $\left[\mathbf{e}^m_{\sigma+}\mathbf{e}^n_{\sigma'-}\right]_{ii}$ avec $i = x, y, z$. Cela permet de décomposer le potentiel en trois contributions correspondant à chaque direction tel que $\mathrm{U}^{(\mathrm{CP})}_{5\mathrm{S}} = \mathrm{U}^{(\mathrm{CP})}_{5\mathrm{S},xx} + \mathrm{U}^{(\mathrm{CP})}_{5\mathrm{S},yy} + \mathrm{U}^{(\mathrm{CP})}_{5\mathrm{S},zz}$, de

manière analogue à [Buhmann et al., 2016], où ils étudient les effets d'une possible anisotropie sur le potentiel [3]. Pour les intégrations de l'expression (4.119), nous prenons les nombres de points suivants $\{N_\xi = 81, N_{kx} = 7, N_{ky} = 51\}$ pour $N_h = 41$ harmoniques de Fourier, valeurs pour lesquelles les résultats ont convergé. Les potentiels calculés sont assez proches de ceux présentés dans [Buhmann et al., 2016]. Les différences que nous constatons proviennent sans doute d'un manque de points sur les intégrations ou sur le nombre d'harmoniques. Avec les paramètres numériques fixés dans nos simulations, un temps de calcul d'environ 2h30 est nécessaire pour calculer le potentiel à chaque position atomique (x_a, z_a).

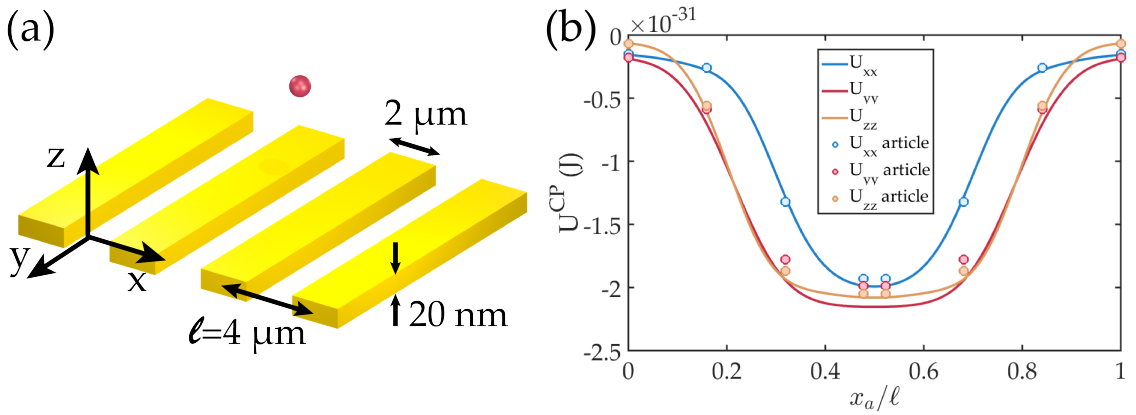


FIGURE 4.15 – **Comparaison de nos résultats avec la littérature sur le potentiel d'interaction entre un atome de ^{87}Rb et un réseau 1D en or.** (a) Schéma de la configuration : un atome de ^{87}Rb dans l'état fondamental à une position (x_a, z_a) d'un réseau en or de période $\ell = 4$ µm, de largeur $w_d = 2$ µm et d'épaisseur $t_d = 20$ nm. (b) Nous traçons nos résultats (traits pleins) correspondant aux différentes contributions du potentiel total exact U^{CP}_{5S} telles que $U^{CP}_{5S} = U^{CP}_{5S,xx} + U^{CP}_{5S,yy} + U^{CP}_{5S,zz}$ et nous les comparons aux résultats de [Buhmann et al., 2016] (points).

■ Surface stratifiée et structurée à 1D

A présent que nous avons validé la méthode numérique et sa convergence, nous nous intéressons au cas de la structure 1D stratifiée optimisée au chapitre précédent. Le calcul des coefficients de réflexion aux fréquences imaginaires s'obtient de manière analogue à la méthode présentée en section 4.3.2 (FMM), en prenant maintenant en compte les différentes couches périodiques (réseaux diélectrique et métallique) et homogènes (vide et silicium). En effet nous rappelons que le métal est également périodiquement structuré (voir chapitre précédent, Fig.3.13). L'idée est donc de résoudre le problème aux valeurs propres défini par (4.106) pour chaque couche périodique, notée Gr_j, nous permettant d'obtenir les vecteurs propres $\mathbf{Q}_j$ et valeurs propres Λ_j correspondants.

Une fois ce problème des valeurs propres résolu, les conditions aux interfaces s'expriment de la façon suivante :

• A l'interface entre le milieu homogène I et le premier réseau diélectrique Gr_1 d'épaisseur t_d, nous avons, d'après (4.114),

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1 & \mathbf{Q}_1 e^{-\sqrt{\Lambda_1} t_d} \\ \mathbf{W}_1 & -\mathbf{W}_1 e^{-\sqrt{\Lambda_1} t_d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{c}_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{i}^{ss} & \mathbf{i}^{sp} \\ \mathbf{i}^{ps} & \mathbf{i}^{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^s \\ \mathbf{I}^p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{r}^s \\ \mathbf{r}^p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{R}^s \\ \mathbf{R}^p \end{pmatrix}. \tag{4.120}$$

• De même, à l'interface entre le deuxième réseau Gr_2 (couche métallique d'épaisseur t_m)

3. Nous parlons ici de l'anisotropie engendrée par la structure 1D sur le potentiel. L'atome reste quant à lui isotrope dans l'état fondamental, soit $\alpha_{xx}(\omega) = \alpha_{yy}(\omega) = \alpha_{zz}(\omega) = \alpha(\omega)$.

et le milieu semi-infini en silicium II, la relation (4.115) nous donne

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}_2 e^{-\sqrt{\Lambda_2} t_m} & \mathbf{Q}_2 \\ \mathbf{W}_2 e^{-\sqrt{\Lambda_2} t_m} & -\mathbf{W}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_2^+ \\ \mathbf{c}_2^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{t}^s \\ \mathbf{t}^p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{T}^s \\ \mathbf{T}^p \end{pmatrix}. \tag{4.121}$$

• On peut montrer que l'interface entre les deux couches périodiques Gr_1 et Gr_2 est décrite par le système suivant [Moharam et al., 1995b] :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1 e^{-\sqrt{\Lambda_1} t_d} & \mathbf{Q}_1 \\ \mathbf{W}_1 e^{-\sqrt{\Lambda_1} t_d} & -\mathbf{W}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1^+ \\ \mathbf{c}_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_2 & \mathbf{Q}_2 e^{-\sqrt{\Lambda_2} t_m} \\ \mathbf{W}_2 & -\mathbf{W}_2 e^{-\sqrt{\Lambda_2} t_m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_2^+ \\ \mathbf{c}_2^- \end{pmatrix}. \tag{4.122}$$

Pour déterminer les coefficients de réflexion en amplitude nous utilisons une approche en résolution partielle décrite dans [Moharam et al., 1995b], qui permet d'obtenir soit les coefficients de réflexion soit les coefficients de transmission mais pas les deux à la fois. Cette méthode est numériquement plus stable. Le principe de cette résolution restreinte est présenté ci-dessous.

▷ ***Coefficients de réflexion en résolution restreinte :***

Pour cela nous pouvons réécrire le système (4.121) tel que

$$\begin{pmatrix} -\mathbf{Q}_2 & \mathbf{f}_3 \\ \mathbf{W}_2 & \mathbf{g}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_2^- \\ \mathbf{c}_3^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_2 e^{-\sqrt{\Lambda_2} t_m} \\ \mathbf{W}_2 e^{-\sqrt{\Lambda_2} t_m} \end{pmatrix} \mathbf{c}_2^+, \tag{4.123}$$

où nous avons utilisé les notations suivantes :

$$\mathbf{f}_3 = \mathbf{t}^s, \quad \mathbf{g}_3 = \mathbf{t}^p \quad \text{et} \quad \mathbf{c}_3^+ = \begin{pmatrix} \mathbf{T}^s \\ \mathbf{T}^p \end{pmatrix}.$$

D'après (4.123), la relation entre les modes se propageant vers les z positifs et ceux vers les z négatifs dans le réseau Gr_2 est donnée par

$$\mathbf{c}_2^- = \alpha_2 \mathbf{c}_2^+, \tag{4.124}$$

tel que

$$\begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{Q}_2 & \mathbf{f}_3 \\ \mathbf{W}_2 & \mathbf{g}_3 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_2 e^{-\sqrt{\Lambda_2} t_m} \\ \mathbf{W}_2 e^{-\sqrt{\Lambda_2} t_m} \end{pmatrix}. \tag{4.125}$$

Avec ces définitions, nous pouvons réécrire les champs à l'interface Gr_2/II tels que

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}_2 & \mathbf{Q}_2 e^{-\sqrt{\Lambda_2} t_m} \\ \mathbf{W}_2 & -\mathbf{W}_2 e^{-\sqrt{\Lambda_2} t_m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_2^+ \\ \mathbf{c}_2^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_2 \\ \mathbf{g}_2 \end{pmatrix} \mathbf{c}_2^+, \tag{4.126}$$

avec

$$\begin{pmatrix} \mathbf{f}_2 \\ \mathbf{g}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_2 \left(\mathbb{1} + e^{-\sqrt{\Lambda_2} t_m} \alpha_2 \right) \\ \mathbf{W}_2 \left(\mathbb{1} - e^{-\sqrt{\Lambda_2} t_m} \alpha_2 \right) \end{pmatrix}. \tag{4.127}$$

De la même manière les champs à l'interface entre les deux réseaux sont décrits par (4.122) que nous pouvons réécrire

$$\begin{pmatrix} -\mathbf{Q}_1 & \mathbf{f}_2 \\ \mathbf{W}_1 & \mathbf{g}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1^- \\ \mathbf{c}_2^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1 & e^{-\sqrt{\Lambda_2} t_d} \\ \mathbf{W}_1 & e^{-\sqrt{\Lambda_2} t_d} \end{pmatrix} \mathbf{c}_1^+. \tag{4.128}$$

En suivant les mêmes étapes que (4.124),(4.125) et (4.126), on montre que

$$\begin{pmatrix} \mathbf{i}^{ss} & \mathbf{i}^{sp} \\ \mathbf{i}^{ps} & \mathbf{i}^{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}^s \\ \mathbf{I}^p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{r}^s \\ \mathbf{r}^p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{R}^s \\ \mathbf{R}^p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{g}_1 \end{pmatrix} \mathbf{c}_1^+, \tag{4.129}$$

avec

$$\begin{pmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{g}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1 \left(\mathbb{1} + \mathrm{e}^{-\sqrt{\Lambda_1} t_d} \alpha_1 \right) \\ \mathbf{W}_1 \left(\mathbb{1} - \mathrm{e}^{-\sqrt{\Lambda_1} t_d} \alpha_1 \right) \end{pmatrix}, \tag{4.130}$$

où α_1 est défini de la même manière que (4.125) ($2 \rightarrow 1$ et $3 \rightarrow 2$). En résolvant le système (4.129), nous pouvons maintenant déterminer les coefficients de réflexion en amplitude pour le cas de la surface stratifiée et structurée à 1D. Dans l'expression (4.129), l'influence des couches inférieures est contenue dans α_1.

■ Influence de la couche métallique

En traitant plusieurs couches périodiques nous augmentons la complexité du problème et en particulier les temps de calculs. Afin de réduire ces derniers, nous étudions l'influence de la couche métallique en traitant deux configurations de réseaux : une première structure, notée $\mathscr{R}_1$, où nous négligeons la partie métallique de la structure 1D puis la seconde, notée $\mathscr{R}_2$, où nous tenons compte de cette couche périodique d'épaisseur $t_m = 10$ nm. Nous reportons ces résultats dans le tableau de la Fig.4.16 pour deux positions transverses de l'atome $z_a = 50{,}700$ nm ainsi que pour les deux positions longitudinales $x_a = 0$ et $x_a = \ell/2$ correspondant respectivement à l'atome au-dessus d'une fente et d'une arête. Selon la position de l'atome z_a le nombre d'harmoniques de Fourier requis doit être adapté pour que la convergence soit obtenue. Par exemple, un nombre d'harmoniques $\mathrm{N}_h = 5$ pour les deux configurations à $z_a = 700$ nm suffit pour que nos résultats convergent (erreur < 1%). Pour une position $z_a = 50$ nm, l'atome est plus proche de la structure et par conséquent plus "sensible" à la modulation périodique du réseau ($z_a < \ell = 100$ nm). Nous prenons $\mathrm{N}_h = 9$ et $\mathrm{N}_h = 15$ pour les réseaux $\mathscr{R}_1$ et $\mathscr{R}_2$, respectivement.

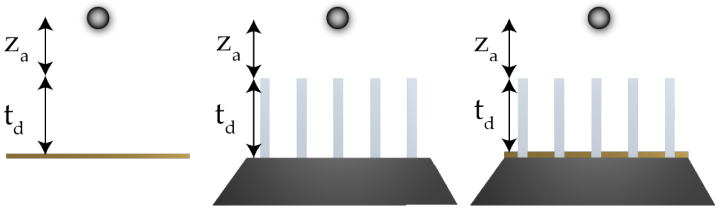
Afin d'évaluer l'influence de la couche métallique, nous présentons également l'énergie d'interaction CP entre un atome de ^{87}Rb et une unique couche en or de même épaisseur. L'interaction résultante engendre un faible décalage (~ kHz) de l'état atomique fondamental. Cela se confirme également sur l'étude des deux configurations $\mathscr{R}_1$ et $\mathscr{R}_2$, notamment pour une distance atome-réseau $z_a = 50$ nm où nous commettons une erreur de 0.11% et 0.06% au-dessus d'une fente et d'une arête, respectivement. Pour $z_a = 700$ nm nous observons que l'influence du réseau est nulle sur le potentiel d'interaction tandis que l'erreur commise en négligeant le métal est plus importante (~ 15%). Dans notre cas, cela nous importe peu car dans notre méthode les atomes sont piégés à des distances inférieures à 100 nm. De plus, les décalages énergétiques étant très faibles à ces grandes distances (quelques centaines de Hz), l'erreur commise sur le potentiel de piégeage final sera négligeable [4].

Ces résultats nous indiquent que dans notre géométrie, nous pouvons négliger la couche périodique d'or dans les simulations. Cela nous permet de simplifier le problème numérique et de gagner sur les temps de calcul. En effet, dans l'exemple précédent, dans le cas où l'atome est à z_a =50 nm, nous réduisons de moitié ce temps en passant d'environ 15.5h pour la configuration $\mathscr{R}_2$ à 8h pour $\mathscr{R}_1$. Cela n'est pas négligeable car nous cherchons à obtenir un profil du potentiel CP à deux dimensions, *i.e.*, dans le plan (xOz).

■ Convergence en fonction de la distance

Pour calculer l'interaction de l'atome de ^{87}Rb dans l'état fondamental avec le réseau, nous avons étudié la convergence du potentiel énergétique selon la position z_a de l'atome en fonction des bornes et du nombre de point pour les intégrations sur les variables $\{\xi, k_x, k_y\}$ ainsi que le nombre d'harmoniques de Fourier. En effet, comme nous l'avons mentionné

4. En effet, le potentiel de piégeage sera de l'ordre du MHz, comme nous le verrons dans le Chapitre 5



z_a	*50 nm*	*50 nm*	*50 nm*
$x_a = 0$ (fente)	-2.38 kHz	-816.7 kHz	-817.1 kHz
$x_a = \ell/2$ (arrête)		-1.428 MHz	-1.427 MHz
z_a	*700 nm*	*700 nm*	*700 nm*
$x_a = 0$ (fente)	-117 Hz	-156 Hz	-185 Hz
$x_a = \ell/2$ (arrête)		-156 Hz	-185 Hz

FIGURE 4.16 – **Influence de la couche périodique en or sur l'interaction entre un atome dans l'état fondamental et la structure 1D.** De gauche à droite sont présentés les résultats du potentiel d'interaction exact entre l'atome et une fine couche de métal d'épaisseur t_m =10 nm,, la surface structurée à 1D sans métal, et la surface stratifiée et structurée avec la couche en or. Les dimensions des arêtes sont celles obtenues lors de l'optimisation, soit w_d = 25 nm, t_d =500 nm et une période ℓ = 100 nm. Les potentiels sont calculées pour deux positions transverses $z_a = 50, 700$ nm au-dessus d'une fente ($x_a = 0$) et d'une arête ($x_a = \ell/2$).

dans le paragraphe ci-dessus, l'influence des modes du réseau est plus ou moins importante selon si l'atome est à proximité de la structure. Ces études nous ont permis de réaliser le découpage numérique présenté dans le Tableau 4.1. Comme nous l'avons brièvement mentionné dans l'étude de l'influence de la couche métallique, davantage d'harmoniques de Fourier sont nécessaires dans les calculs lorsque l'atome se rapproche de la surface structurée, tandis que le nombre de points pour la variable k_x devient moins important. En effet, lorsque l'atome est très proche de la surface ($z_a << \ell$), seuls les ordres de diffraction les plus élevés contribuent, ainsi k_x^m dans l'expression (4.82) devient $k_x^m \sim m2\pi/\ell$.

position atome	N_{k_x}	N_{k_y}	N_ξ	N_h
$z_a < 10$ nm	5	201	151	21
10 nm $\leq z_a < 30$ nm	5	201	151	15
30 nm $\leq z_a < 50$ nm	7	201	151	7
50 nm $\leq z_a < 100$ nm	11	201	101	5
100 nm $\leq z_a < 200$ nm	15	201	101	3
200 nm $\leq z_a < 300$ nm	21	201	101	3
300 nm $\leq z_a$	51	201	101	1

TABLEAU 4.1 – **Découpage numérique utilisé pour les intégrations dans le calcul du potentiel d'interaction entre l'atome et la surface structurée.**

Ceci étant posé, nous pouvons à présent calculer l'énergie d'interaction entre l'atome de ^{87}Rb dans l'état 5S et la surface stratifiée à 1D. Le potentiel correspondant est tracé en Fig.4.17(a) en fonction de la position transverse z_a de l'atome et pour différentes positions longitunales x_a. Nous reportons également en Fig.4.17(b) des coupes du potentiel dans la direction (Ox) pour plusieurs positions z_a. Nous pouvons alors observer la modulation du potentiel CP engendrée par la présence du réseau en verre. Cette modulation est d'autant plus forte que l'atome est proche de la surface. On notera que les échelles verticales des deux

tracés sont logarithmiques. Nous obtenons par exemple des profondeurs de potentiels allant de 45 kHz à 18 MHz lorsque l'atome s'approche de $z_a = 75$ nm à $z_a = 25$ nm, respectivement.

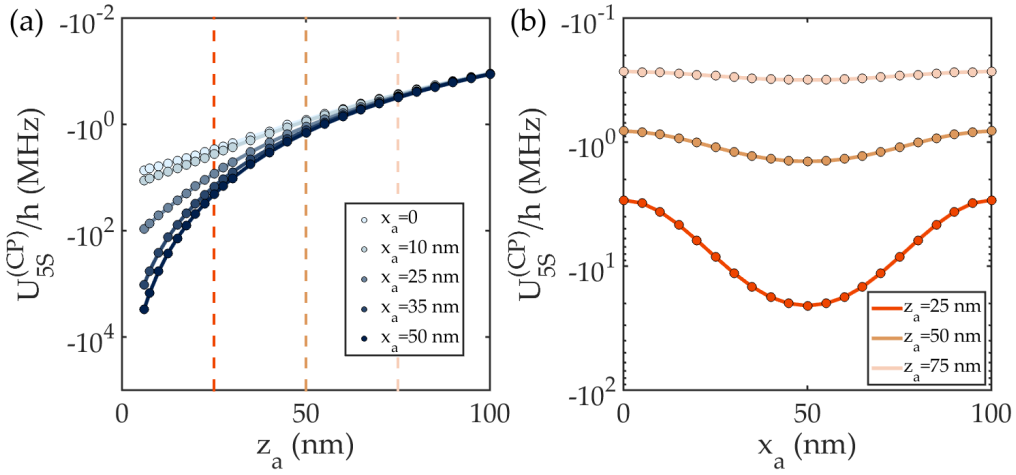


FIGURE 4.17 – **Potentiel d'interaction entre un atome de ^{87}Rb dans l'état fondamental et la surface structurée à 1D en fonction de la position atomique.** (a) Le potentiel d'interaction $U_{5S}^{(CP)}$ est tracé en fonction de la position transverse z_a pour différentes positions longitudinales x_a ($x_a = 0$ et $x_a = \ell/2 = 50$ nm correspondent à l'atome au-dessus d'une fente et d'une arête, respectivement). (b) Coupes du potentiel d'interaction en fonction de x_a pour 3 positions transverses z_a, représentées par les traits pointillés en (a). La présence des arêtes diélectriques permet une modulation du potentiel de période $\ell = 100$ nm.

État excité

Comme expliqué dans la partie (4.2.3), le calcul du déplacement énergétique de l'état excité comprend à la fois un terme non-résonant, similaire au cas de l'état fondamental, et un terme résonant. L'influence de chacun de ces termes est détaillée ci-dessous.

■ Terme non-résonant

La partie non-résonante du potentiel CP de l'état excité interagissant avec le réseau 1D est donnée par (4.119) où l'on substitue la polarisabilité $\alpha_{5S}(i\xi)$ par celle de l'état 5P $\alpha_{5P}(i\xi)$. Nous reportons les résultats du potentiel U_{5P}^{nres} en Fig.4.18 en fonction de la position transversale z_a et différentes positions x_a allant de 0 (fente) à $\ell/2$ (arête). Nous avons également ici une modulation par le réseau de l'état excité.

■ Terme résonant

Pour calculer la partie résonante de l'état excité nous devons connaître les coefficients de réflexion en fréquences réelles. Pour cela nous avons tenté d'implémenter la méthode décrite précédemment pour des fréquences réelles, mais lorsque nous avons comparé nos résultats sur les amplitudes de réflexion calculées avec Reticolo par exemple [Hugonin and Lalanne, 2005], ceux-ci présentaient quelques différences dans certaines configurations d'incidence. N'ayant pas réussi à déceler l'origine de cette différence, nous avons décidé par souci d'efficacité, d'utiliser Reticolo pour le calcul des coefficients de réflexion en amplitude pour les modes propagatifs et évanescents. De la même manière que pour le cas d'une structure plane, nous séparons ici les contributions de ces deux types de modes.

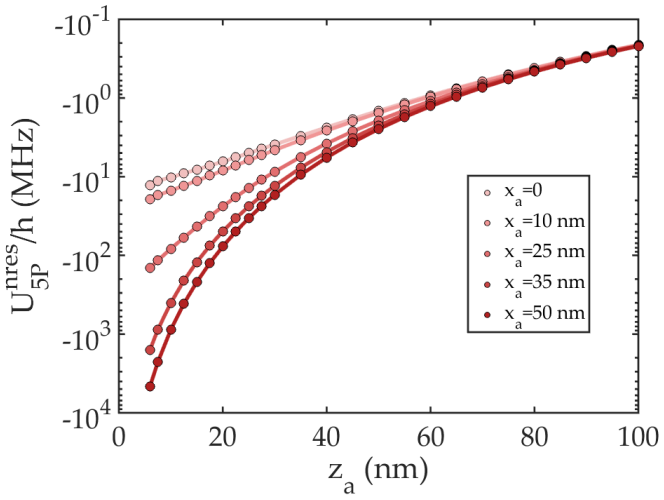


FIGURE 4.18 – **Partie non-résonante du potentiel d'interaction entre un atome de ^{87}Rb dans l'état excité et la surface structurée à 1D en fonction de la position atomique.** La partie non-résonante U_{5P}^{nres} du potentiel d'interaction est tracé en fonction de la position transverse z_a pour différentes positions longitudinales x_a.

▷ ***Contribution propagative***

La partie propagative correspond aux vecteurs d'ondes tels que $k_{\parallel}^{m} \leq k_0$. Par conséquent nous sélectionnons dans notre programme les vecteurs d'ondes qui respectent cette condition. Dans un premier temps le vecteur k_x^m est pris dans la première zone de Brillouin. Ceci fixe les bornes d'intégration sur la composante k_y tel que $k_y \in \left[-k_y^{max}, k_y^{max}\right]$ avec $k_y^{max} = \sqrt{k_0^2 - k_x^{m2}}$. Nous présentons en Fig.4.19(a) les intégrants de k_y pour différentes valeurs de k_x et en Fig.4.19(b) l'intégrant de $k_x^{m=7}$ avant l'intégration finale sur k_x. La configuration correspond à un atome à la position $z_a = 10$ nm entre deux arêtes du réseau ($x_a = 0$) avec $N_h = 7$ harmoniques de Fourier. En Fig.4.19(c) nous présentons les résultats de convergence de la partie résonante propagative en fonction du nombre total de points ($N_{k_x} \times N_{k_y}$) pour différents nombres d'harmoniques de Fourier N_h. Un nombre d'harmoniques N_h=7 et des nombres de points $\{N_{k_x} = 301, N_{k_x} = 601\}$ (soit $N_{k_x} \times N_{k_y} = 1.8 \times 10^5$) permettent d'obtenir ici un décalage convergé de l'état 5P de l'ordre de 0.3 MHz.

▷ ***Contribution évanescente***

Nous traitons à présent la partie résonante évanescente, soit $k_{\parallel}^{m} < k_0$. Pour cela nous fixons des bornes sur l'intégration de k_y à optimiser puis nous sélectionnons tous les vecteurs d'ondes $k_{\parallel}^{m}$ vérifiant la condition précédente. Comme dans le cas de la partie propagative nous présentons en Fig.4.20(a) l'intégrant de k_y. Nous avons choisi ici une configuration différente pour laquelle $z_a = 3$ µm où l'effet du réseau devrait être minime. De même que pour la contribution propagative, nous reportons également en Fig.4.20(c) l'intégrant pour $k_x^{m=0} = k_x$ avant intégration finale sur k_x . Sur la Fig.4.20(c), nous traçons le résultat des calculs en fonction du nombre de points total pour un nombre d'harmoniques $N_h = 1$ (pour un nombre $N_h = 3$ le résultat varie de seulement quelques pour cents, ce qui est négligeable dans cette étape de première optimisation). Mais nous constatons que le résultat ne converge pas, ou bien difficilement, malgré le grand nombre de points défini. Par ailleurs le dernier résultat de cette courbe (pour $N_{k_x} \times N_{k_y} = 16$ millions) a nécessité une semaine de calculs, ce qui n'est pas optimal. Par conséquent nous avons décidé de négliger la partie résonante du potentiel d'interaction de l'atome excité. Ce choix peut notamment se justifier lorsque nous étudierons les ordres de grandeur des décalages induits optiquement par le laser à 1529 nm.

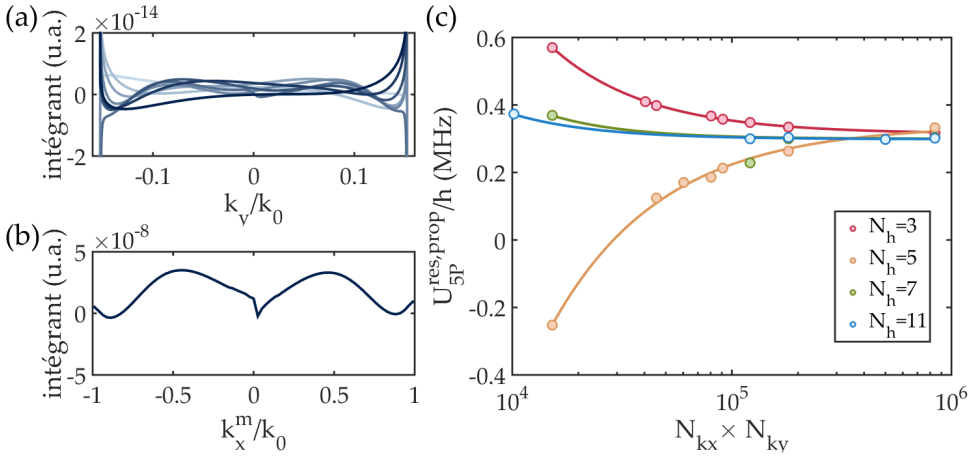


FIGURE 4.19 – **Étude de la convergence de la partie résonante propagative de l'interaction entre le réseau 1D et l'atome dans l'état 5P.** Nous présentons les intégrants (a) avant intégration sur k_y pour différentes de valeurs de k_x (les couleurs du plus clair au plus foncé signifie que k_x augmente) et (b) avant intégration finale sur k_x. (c) Évolution de la partie résonante propagative de l'interaction en fonction du nombre de points pris sur les intégrations des composantes du vecteur d'onde N_{kx} et N_{ky}, pour différents nombres d'harmoniques de Fourier N_h.

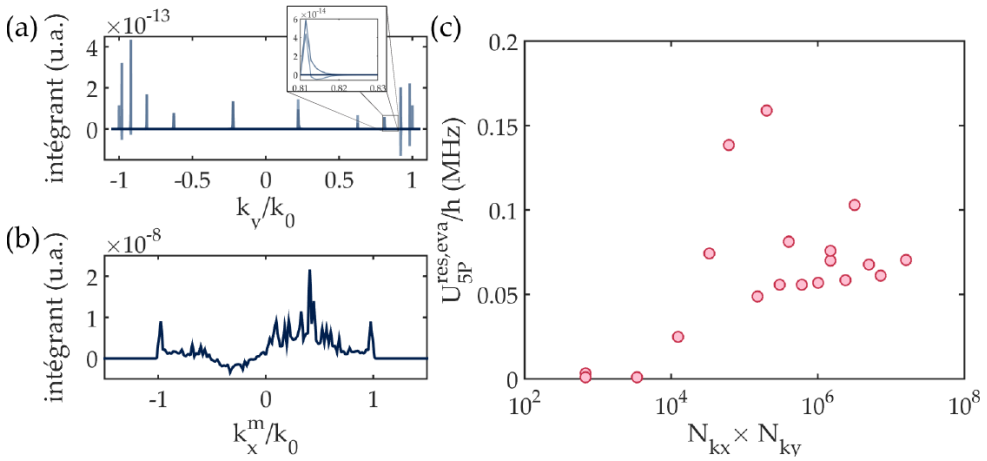


FIGURE 4.20 – **Étude de la convergence de la partie résonante évanescente de l'interaction entre le réseau 1D et l'atome dans l'état 5P.** Nous présentons les intégrants (a) avant intégration sur k_y pour différentes de valeurs de k_x (les couleurs du plus clair au plus foncé signifie que k_x augmente) avec un *zoom* sur l'un des pics observés (voir *inset*) et (b) avant intégration finale sur k_x. (c) Évolution de la partie résonante évanescente de l'interaction en fonction du nombre de points pris sur les intégrations des composantes du vecteur d'onde N_{k_x} et N_{k_y}, pour un nombres d'harmoniques de Fourier $N_h = 1$. Les sauts entre certains points correspondent à un changement de définition de la composante k_y dans l'intégration (e.g., modification du découpage numérique).

■ **Vers une approximation PWS**

Une perspective pour avoir une estimation de la partie résonante avec un réseau serait d'utiliser l'approximation PWS décrite plus haut. Pour vérifier l'erreur commise avec cette approximation, nous nous sommes concentrés sur la partie non-résonante de l'état excité 5P, afin de comparer au cas exact que nous connaissons. En effet, le potentiel non-résonant de cet état a été déterminé de manière exacte (cf. Fig.4.17).

Pour cela nous réécrivons l'intégration sur la géométrie (4.89) afin de faire correspondre le volume de diélectrique à une **seule** arête du réseau. Ainsi, pour des arêtes de largeur w_d et de hauteur t_d les intégrations sur x_m et y_m se font dorénavant entre les bornes $[-w_d/2, w_d/2]$ et $[-\infty, +\infty]$, respectivement. Nous résolvons alors numériquement cette intégrale pour les trois positions suivantes $x_a = 0, \ell/2$ et ℓ. Les potentiels respectifs $\mathrm{U}_{n-1a}^{\mathrm{PWS},nres}(x_a = 0, z_a, t_d)$, $\mathrm{U}_{n-1a}^{\mathrm{PWS},nres}(x_a = \ell/2, z_a, t_d)$ et $\mathrm{U}_{n-1a}^{\mathrm{PWS},nres}(x_a = \ell, z_a, t_d)$ (toujours définis par (4.88) où l'indice "1a" signifie "1 arête") sont ensuite sommés selon la position de l'atome, comme le résume la Fig.4.21(a). Pour comparer les résultats nous traitons deux exemples correspondant aux deux positions $x_a = 0$ et $x_a = \ell/2$ dont le calcul est effectué de la manière suivante :

- pour calculer l'interaction lorsque l'atome est au-dessus d'une fente, soit $x_a = \ell/2$, nous définissons la partie non-résonante du potentiel total caractérisant l'interaction avec le réseau diélectrique Gr telle que

$$\mathrm{U}_{n-\mathrm{G}r}^{\mathrm{PWS},nres}(x_a = \ell/2, z_a) = 2\mathrm{U}_{n-1a}^{\mathrm{PWS},nres}(x_a = \ell/2, z_a, t_d). \tag{4.131}$$

Nous prenons ici en compte seulement l'effet des deux arêtes les plus proches car l'interaction avec les arêtes suivantes est négligeable.

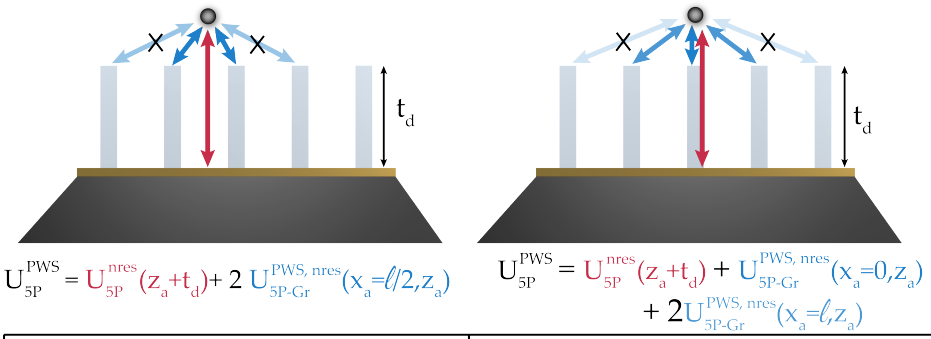
- à l'inverse, pour calculer l'interaction lorsque l'atome est au-dessus d'une arête, soit $x_a = 0$, la partie non-résonante du potentiel total est définie telle que

$$\mathrm{U}_{n-\mathrm{G}r}^{\mathrm{PWS},nres}(x_a = 0, z_a) = \mathrm{U}_{n-1a}^{\mathrm{PWS},nres}(x_a = 0, z_a, t_d) + 2\mathrm{U}_{n-1a}^{\mathrm{PWS},nres}(x_a = \ell, z_a, t_d). \tag{4.132}$$

La contribution non-résonante du potentiel d'interaction entre l'atome dans l'état 5P et la partie stratifiée Au/Si de la nanostructure $\mathrm{U}_{5\mathrm{P}}^{(\mathrm{CP})}(z_a + t_d)$ est calculée de manière exacte en utilisant la relation (4.74) définie précédemment (où 5S→5P) pour une position $z_a + t_d$ (cf. Fig.4.21(a)). Nous considérons deux positions transverses $z_a = 25$ nm et $z_a = 100$ nm dont les résultats sont résumés en Fig.4.21(b). Dans l'approximation PWS nous constatons que la partie non-résonante du potentiel d'interaction est majoritairement sous-estimée ainsi qu'une erreur commise plus importante au-dessus du diélectrique.

L'erreur réalisée dans cette estimation PWS reste assez élevée (22%) dans la région de l'espace où les atomes sont piégés avec notre méthode (quelques dizaines de nm, comme nous le verrons dans le dernier chapitre). Ainsi nous n'utiliserons pas cette approximation pour le calcul de la partie résonante de l'état excité (5P) et nous conserverons uniquement la partie non-résonante dans l'approche exacte.

(a)



$U_{5P}^{PWS} = U_{5P}^{nres}(z_a+t_d) + 2\,U_{5P\text{-}Gr}^{PWS,\,nres}(x_a=\ell/2,z_a)$

$U_{5P}^{PWS} = U_{5P}^{nres}(z_a+t_d) + U_{5P\text{-}Gr}^{PWS,\,nres}(x_a=0,z_a) + 2U_{5P\text{-}Gr}^{PWS,\,nres}(x_a=\ell,z_a)$

(b)

	$x_a = 0$			$x_a = \ell/2$		
	pws	**exact**	**erreur relative**	**pws**	**exact**	**erreur relative**
z_a **= 25 nm**	-5.76 MHz	-5.30 MHz	**9%**	-39.47 MHz	-32.38 MHz	**22%**
z_a **= 100 nm**	-198 kHz	-211 kHz	**6%**	-229 kHz	-219 kHz	**5%**

FIGURE 4.21 – **Comparaison des calculs de la partie non-résonante caractérisant l'interaction entre un atome dans l'état 5P et la structure 1D dans l'approximation PWS.** (a) Méthode d'approximation PWS : la contribution du réseau est sommée à la contribution de la partie stratifiée selon la position de l'atome. (b) Résultats des calculs et comparaison avec le cas exact pour deux positions transverses $z_a = 25$ nm et $z_a = 100$ nm ainsi que deux positions longitudinales $x_a = 0$ (fente) et $x_a = \ell/2 = 50$ nm (arête).

4.4 Conclusion et perspectives

Nous avons présenté les calculs des différents potentiels d'interaction du vide entre la structure et un atome de ^{87}Rb. En particulier nous avons traité le cas des deux structures géométriques optimisées au chapitre précédent ainsi que les deux états atomiques fondamental et excité. Nous avons implémenté une méthode de calcul exacte qui tient compte des modes de la nanostructure. Cela nous aura permis de déterminer les parties non-résonantes des potentiels interactions des états atomiques 5S et 5P. S'agissant de l'état excité 5P, nous n'avons pas pu faire converger la partie évanescente qui contribue majoritairement à la partie résonante (propagative + évanescente) quand $z_a < \lambda_0$. Ainsi, dans nos simulations nous considérons uniquement la partie non-résonante de l'état excité, dominante à faibles distances. D'autant plus que dans notre méthode de piégeage, le décalage énergétique de l'état 5P est principalement dû au laser à 1529 nm, nous laissant une certaine marge d'erreur sur l'estimation du potentiel CP pour cet état. Par ailleurs nous constatons qu'il est possible d'obtenir des modulations du potentiel énergétique 5S avec des amplitudes variées. Cela nous permettra, comme nous le verrons dans le chapitre suivant, de créer des réseaux sublongueur d'ondes afin de piéger les atomes.

Pour aller plus loin il serait intéressant d'estimer la température de la surface induite par les lasers afin de vérifier que l'approche utilisée dans ce chapitre, *i.e.*, à température nulle et à l'équilibre thermodynamique, est toujours valide. Par ailleurs, la théorie des perturbations utilisée dans le calcul du potentiel CP en section 4.2 est valide dans une approche statique, ce qui est justifié pour de grands désaccords lasers comparés aux transitions atomiques. Or dans notre configuration de piégeage le désaccord peut s'approcher de la résonance pour des positions proches de la nanostructure, comme nous le verrons dans le chapitre suivant. Pour une estimation plus précise des énergies d'interactions, il pourrait être intéressant de prendre en compte la dynamique interne de l'atome en utilisant une approche non-perturbative [Buhmann et al., 2004] et la dépendance spatiale de la fréquence de transition entre les états fondamental et excité. A cela peut s'ajouter l'interaction entre le dipôle induit et le champ induit par ce dipôle, pouvant modifier l'interaction [Fuchs et al., 2018].

4.5 Summary

In this chapter we discussed all the non-optical part of our trapping method. In the first section 4.1 we briefly reviewed the different interactions arising from quantum vacuum fluctuations between two atoms (van der Waals interaction), between an atom and a macroscopic body (Casimir-Polder interaction) and between two macroscopic bodies (Casimir interaction). The CP interaction corresponds to our configuration and results in an attractive force for a ground-state atom. The corresponding potential follows a $-1/z^3$ or $-1/z^4$ in the vDW ($z << \lambda_0$) or CP ($z >> \lambda_0$) regimes, respectively. We noted λ_0 the characteristic atomic transition wavelength. In Fig.4.1 we summarized various calculations methods (e.g., QED or Lifshitz theory) depending on the configuration and the separation distance.

In second part 4.2 we detailed all the calculations to obtain the CP interaction potentials. This was done within a perturbative approach. We introduced some quantum electrodynamics (QED) elements to express electric field. Then we used this result to express the perturbed shift of the atomic states with the multipolar hamiltonian scheme within the second-order perturbation theory. Unlike most of the problems in photonics, CP effect is due to a large frequency range resulting in a complex numerical solution. To overcome this problem, one must use some mathematical tricks from complex analysis and integrate over imaginary frequencies $\omega = i\xi$. Considering an atom in state $|n\rangle$ we saw that the potential split into two parts. The first one, given by (4.52), is due to virtual photons and is named the non-resonant part. It is proportional to the product of atomic polarizability α_n with scattering Green tensor $G^{(1)}$. The latter describes the round trip of electromagnetic field between the atom and the nanostructure. It also contains the optical response of the surface. The second part, given by (4.50), is due to possible real emitted photon (if the atom is excited) and is named the resonant part. The non-resonant part was solved by integrating over imaginary frequencies. Thus in section 4.2.5, we expressed the atomic polarizability and material permittivity over imaginary frequencies (cf. Fig.4.3). The calculations were done by considering a environment temperature $T \to 0$ K. This approximation is justified for atom positions $z_a << \lambda_T = \hbar c/k_B T \sim 7.6$ µm at T = 300 K, where we have defined λ_T as the wavelength of thermal photons (see Fig.4.4).

In section 4.3, we first determined the scattering Green tensor for a planar and stratified structure (4.59). To calculate this tensor we needed the amplitude reflection coefficients at real and imaginary frequencies to describe the optical response of the nanostructure. Consequently we used Fresnel relations for multilayered structures. Then we calculated the interaction potential for the atom in ground and excited states in Fig.4.7 and Fig.4.8, respectively. We extended the calculations to the 1D structure optimized in the previous chapter. We followed the same procedure as for the planar case by first expressing the scattering tensor for one-dimensional gratings (see definition (4.81)). This expression requires to know the amplitude reflection coefficients for a grating over the entire frequency range. Because this task can sometimes be arduous, we first wanted to evaluate the potential within the pairwise summation (PWS) approximation. It consists to sum all the atom-molecule interactions. Thus we compared the results obtained with PWS for a ^{87}Rb atom in front of a planar surface to the exact ones. The results were qualitatively and quantitatively agreeing at a 25% level. We estimated that the residual disagreement was related to mode and shielding effects. To go beyond the PWS approximation and to take into account the modal nature of the 1D-structured surface, we implemented the Fourier modal method (FMM) to calculate the reflection coefficients. The FMM was detailed in section 4.3.2. The numerical results we obtained agreed with literature, as shown in Fig.4.15. Moreover we showed that the periodic gold layer could be neglected in the numerical simulations in order to gain computation time and memory (see Fig.4.16). After we discussed the convergence study for numerical integrations, we plotted the non-resonant parts for the ground (5S) and excited (5P) states of a ^{87}Rb atom in front of the periodically-structured surface in Fig.4.17 and Fig.4.18, respectively. Both potentials present a variable amplitude modulation due to the presence of the

dielectric ridges with the same period as the grating ($\ell = 100$ nm).

In the last part of section 4.3, we explained that we had some difficulties to make the resonant part of the excited state (5P) converge. Consequently, we will only take into account the non-resonant part for this atomic state which, in any case, dominates at short distances. In our method, this approximation is especially justified by the fact that the shift of the 5P state is dominated by the optical contribution. As a perspective, to go further in the CP potential calculations, one could apply a non-perturbative approach in order to take into account the internal dynamics of the atom (e.g., a spatially-dependent polarizability).

Références

Brown, J. W. and Churchill, R. V. (2009). *Complex variables and applications*. McGraw-Hill, 8th edition. 131

Buhmann, S. Y. (2012a). *Dispersion forces I : macroscopic quantum electrodynamics and ground-state Casimir, Casimir-Polder and van der Waals Forces*. Springer. 124, 128, 129, 131

Buhmann, S. Y. (2012b). *Dispersion Forces II : Many-Body Effects, Excited Atoms, Finite Temperature and Quantum Friction*. Springer. 135

Buhmann, S. Y., Dung, H. T., Kampf, T., Knöll, L., and Welsch, D. G. (2005). Atoms near Magnetodielectric Bodies : van der Waals Energy and the Casimir–Polder Force. *Optics and Spectroscopy*, 99(3) :466. 130

Buhmann, S. Y., Knöll, L., Welsch, D.-G., and Dung, H. T. (2004). Casimir-Polder forces : A nonperturbative approach. *Physical Review A*, 70(5) :052117. 126, 161

Buhmann, S. Y., Marachevsky, V. N., and Scheel, S. (2016). Impact of anisotropy on the interaction of an atom with a one-dimensional nano-grating. *International Journal of Modern Physics A*, 31(02n03) :1641029. 142, 152, 153

Casimir, H. (1948). On the Attraction Between Two Perfectly Conducting Plates. *Kon. Ned. Akad. Wetensch. Proc.*, 51. 125

Casimir, H. B. G. and Polder, D. (1948). The Influence of Retardation on the London-van der Waals Forces. *Physical Review*, 73(4) :360–372. 124, 125

Chew, W. C. (1995). *Waves and fields in inhomogeneous media*. IEEE Press. 137, 138

Clausius, R. (1879). *Die mechanische U'grmetheorie*. 2 edition. 143

Contreras-Reyes, A. M., Guérout, R., Neto, P. A. M., Dalvit, D. A. R., Lambrecht, A., and Reynaud, S. (2010). Casimir-Polder interaction between an atom and a dielectric grating. *Physical Review A*, 82(5) :052517. 142

Dalvit, D., Milonni, P., Roberts, D., and da Rosa, F., editors (2011). *Casimir Physics*, volume 834 of *Lecture Notes in Physics*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg. 134

de Boer, J. H. (1936). The influence of van der Waals' forces and primary bonds on binding energy, strength and orientation, with special reference to some artificial resins. *Transactions of the Faraday Society*, 32(0) :10. 125

Dung, H. T., Buhmann, S. Y., Knöll, L., Welsch, D.-G., Scheel, S., and Kästel, J. (2003). Electromagnetic-field quantization and spontaneous decay in left-handed media. *Physical Review A*, 68(4) :043816. 129

Dzyaloshinskii, I. E., Lifshitz, E. M., and Pitaevskii, L. P. (1961). General theory of van der waals' forces. *Soviet Physics Uspekhi*, 4(2) :153–176. 125

Fuchs, S., Bennett, R., and Buhmann, S. Y. (2018). Casimir-Polder Potential of a Driven Atom. 161

Granet, G. and Guizal, B. (1996). Efficient implementation of the coupled-wave method for metallic lamellar gratings in TM polarization. *Journal of the Optical Society of America A*, 13(5) :1019. 150

Guérout, R., Lussange, J., Chan, H. B., Lambrecht, A., and Reynaud, S. (2013). Thermal Casimir force between nanostructured surfaces. *Physical Review A*, 87(5) :052514. 148, 151

Hamaker, H. (1937). The London—van der Waals attraction between spherical particles. *Physica*, 4(10) :1058–1072. 125

Hugonin, J.-P. and Lalanne, P. (2005). *Reticolo software for grating analysis, textdisponible sur https ://www.lp2n.institutoptique.fr/Membres-Services/Responsables-d-equipe/LALANNE-Philippe*. Institut d'Optique, Palaiseau. 157

Jackson, J. D. (1975). *Classical electrodynamics*. Wiley. 127

Lalanne, P. and Morris, G. M. (1996). Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization. *Journal of the Optical Society of America A*, 13(4) :779. 150

Lamb, W. E. and Retherford, R. C. (1947). Fine Structure of the Hydrogen Atom by a Microwave Method. *Physical Review*, 72(3) :241–243. 130

Landau, L. D. and Lifshitz, E. M. (1980). *Course of Theoritical Physics : Statistical physics, Part 1*. Butterwort edition. 125, 134

Lennard-Jones, J. E. (1932). Processes of adsorption and diffusion on solid surfaces. *Transactions of the Faraday Society*, 28(0) :333. 124

Li, L. (1996). Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures. *Journal of the Optical Society of America A*, 13(9) :1870. 150

Lifshitz, E. (1956). The theory of molecular attractive forces between solids. *Sov. Phys. JETP 2*, 2 :73–83. 126

London, F. (1937). The general theory of molecular forces. *Transactions of the Faraday Society*, 33(0) :8b. 124

McLachlan, A. D. (1963). Retarded Dispersion Forces Between Molecules. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 271(1346) :387–401. 125

Milonni, P. W. (1994). *The quantum vacuum : an introduction to quantum electrodynamics*. Academic Press. 130

Moharam, M. G., Gaylord, T. K., Grann, E. B., and Pommet, D. A. (1995a). Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings. *Journal of the Optical Society of America A*, 12(5) :1068. 148, 150, 152

Moharam, M. G., Gaylord, T. K., Pommet, D. A., and Grann, E. B. (1995b). Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings : enhanced transmittance matrix approach. *Journal of the Optical Society of America A*, 12(5) :1077. 154

Mosssotti, O. (1850). *Mem. di mathem. e fisica in Modena*. 24 11 edition. 143

Obrecht, J. M., Wild, R. J., Antezza, M., Pitaevskii, L. P., Stringari, S., and Cornell, E. A. (2007). Measurement of the Temperature Dependence of the Casimir-Polder Force. *Physical Review Letters*, 98(6) :063201. 135

Palik, E. D. (1998). *Handbook of optical constants of solids*. Academic Press. 134

Perina, J. (2001). *Coherence and statistics of photons and atoms*. Wiley edition. 127, 128

Power, E. A. and Thirunamachandran, T. (1993). Quantum electrodynamics with nonrelativistic sources. V. Electromagnetic field correlations and intermolecular interactions between molecules in either ground or excited states. *Physical Review A*, 47(4) :2539–2551. 143, 146

Power, E. A. and Thirunamachandran, T. (1995). Dispersion forces between molecules with one or both molecules excited. *Physical Review A*, 51(5) :3660–3666. 143, 146

Sushkov, A. O., Kim, W. J., Dalvit, D. A. R., and Lamoreaux, S. K. (2011). Observation of the thermal Casimir force. *Nature Physics*, 7(3) :230–233. 135

Chapitre 5

Méthode de piégeage et structuration d'un potentiel sublongueur d'onde

« Ce n'est pas parce que les choses sont difficiles que nous n'osons pas les faire. C'est parce que nous n'osons pas les faire qu'elles sont difficiles »

Sénèque

Sommaire

5.1 Formalisme de l'atome habillé . . . 168
5.1.1 Notations . . . 168
5.1.2 Atome habillé . . . 169
5.2 Méthode de piégeage . . . 171
5.2.1 Piégeage transversal : barrière de potentiel . . . 171
5.2.2 Piégeage longitudinal : modulation CP . . . 171
5.3 Potentiel de piégeage . . . 172
5.3.1 Équations de Bloch optiques . . . 172
5.3.2 Force de piégeage . . . 174
5.4 Caractérisation du piège longitudinal . . . 176
5.4.1 Notations . . . 176
5.4.2 Influence des paramètres expérimentaux sur la géométrie . . . 177
5.4.3 Fonction d'onde et énergie de l'état fondamental . . . 177
5.4.4 Condition d'adiabaticité . . . 180
5.4.5 Taux de diffusion . . . 180
5.4.6 Chauffage . . . 181
5.4.7 Effet tunnel . . . 181
5.4.8 Effet anti-amortissement . . . 183
5.4.9 Chauffage transitoire . . . 185
5.4.10 Temps de vie du piège . . . 186
5.5 Caractérisation du réseau 1D . . . 188
5.5.1 Création du réseau 1D . . . 189
5.5.2 Temps de vie . . . 189
5.5.3 Contrôle de la géométrie . . . 191
5.6 Synthèse des résultats et conclusions . . . 192
5.7 Summary . . . 193

Les deux chapitres précédents nous ont permis de lister les ingrédients nécessaires à notre méthode de piégeage. A présent, nous disposons de tous les outils pour calculer le potentiel de piégeage total auquel les atomes de ^{87}Rb seront soumis. Pour cela nous introduirons tout d'abord le formalisme de l'atome habillé avec lequel nous expliquerons en détail la création du piège. Une fois que nous aurons calculé le potentiel énergétique total nous caractériserons dans un premier temps la géométrie et les temps caractéristiques au sein du piège obtenu. Puis nous étendrons la méthode de calcul au cas de la surface stratifiée et structurée optimisée précédemment. Enfin nous conclurons sur les résultats obtenus.

5.1 Formalisme de l'atome habillé

Nous décrivons ici le formalisme de l'atome habillé qui permet décrire le couplage entre l'atome et le champ, de manière simple et intuitive [Cohen-Tannoudji, 1971].

5.1.1 Notations

Nous considérons un atome à deux niveaux : $|g\rangle$ ≡ état fondamental et $|e\rangle$ ≡ état excité. En présence d'un champ électrique, le hamiltonien se décompose en trois parties :

$$\hat{\mathscr{H}} = \hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{A}} + \hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{F}} + \hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{AF}}, \tag{5.1}$$

avec $\hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{A}}$ le hamiltonien qui décrit la dynamique de l'atome donné par (3.27), $\hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{F}}$ le hamiltonien du champ électrique et $\hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{AF}}$ le hamiltonien de couplage qui caractérise l'interaction entre le champ et le dipôle atomique donné par (3.29). Nous rappelons leurs expressions ici :

$$\begin{cases} \hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{A}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \hbar\omega_{eg}\,|e\rangle\langle e|\,, \\ \hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{F}} = \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda \hat{a}_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger, \\ \hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{AF}} = -\mathbf{d}\cdot\left[\hat{\sigma}\mathbf{E}^{(-)}(\hat{\mathbf{R}}) + \hat{\sigma}^\dagger\mathbf{E}^{(+)}(\hat{\mathbf{R}})\right], \end{cases} \tag{5.2}$$

où $\hat{a}_\lambda$ et $\hat{a}_\lambda^\dagger$ sont respectivement les opérateurs destruction et création d'un photon dans le mode λ du laser. Par ailleurs nous nous sommes placés dans l'approximation des ondes tournantes pour l'écriture de l'hamiltonien d'interaction, avec $\mathbf{d} = \mathbf{d}_{eg} = \mathbf{d}_{ge}$ (car supposé réel). $\mathbf{E}^{(+)}$ et $\mathbf{E}^{(-)}$ sont les composantes fréquentielles positives et négatives du champ à la position $\mathbf{R}$:

$$\mathbf{E}^{(+)}(\hat{\mathbf{R}}) = \sum_\lambda \mathscr{E}_\lambda(\hat{\mathbf{R}})\,\hat{a}_\lambda, \tag{5.3}$$

$$\mathbf{E}^{(-)}(\hat{\mathbf{R}}) = \sum_\lambda \mathscr{E}_\lambda^*(\hat{\mathbf{R}})\,\hat{a}_\lambda^\dagger, \tag{5.4}$$

avec les composantes de Fourier du champ $\mathscr{E}_\lambda$.

Nous nous plaçons en outre dans l'approximation dipolaire-électrique en considérant l'extension de l'atome négligeable comparé à la longueur d'onde du champ électrique, *i.e.*, nous remplaçons l'opérateur position $\hat{\mathbf{R}}$ par sa valeur moyenne $\langle\hat{\mathbf{R}}\rangle = \hat{\mathbf{r}}$. Enfin, nous considérons des vitesses atomiques (énergies cinétiques) faibles comparé à la largeur de transition de l'état excité Γ_0, telles que

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \ll \hbar\Gamma_0. \tag{5.5}$$

5.1.2 Atome habillé

Le système global est noté {atome+champ} dont la base associée correspond au produit vectoriel des états propres de $\hat{\mathscr{H}}_A$ et de $\hat{\mathscr{H}}_F$ notés respectivement $|i\rangle$ ($i = g, e$) et $|n_L\rangle$, avec n_L le nombre de photons dans le mode du laser, soit $|i\ n_L\rangle = |i\rangle \otimes |n_L\rangle$. Ainsi les hamiltoniens $\hat{\mathscr{H}}_A$ et $\hat{\mathscr{H}}_F$ sont diagonaux dans cette base, contrairement au hamiltonien d'interaction $\hat{\mathscr{H}}_{AF}$.

En l'absence de couplage entre l'atome et le rayonnement, les états propres de $\hat{\mathscr{H}}_A + \hat{\mathscr{H}}_F$ sont les états découplés $|i\ n_L\rangle$ dont les énergies associées sont $n_L\hbar\omega_L$ pour $i = g$ (atome dans état fondamental) et $n_L\hbar\omega_L + \hbar\omega_{eg}$ pour $i = e$ (atome dans état excité). Nous présentons en Fig.5.1(a) les états énergétiques dans le formalisme de l'atome habillé. Lorsque le laser est proche de résonance ($|\delta| = |\omega_L - \omega_{eg}| << \omega_L, \omega_{eg}$), les états propres non-perturbés s'organisent en multiplicité $M_{n_L} = \{|g\ n_L\rangle, |e\ n_L - 1\rangle\}$ dont les deux états sont séparés d'une quantité $\hbar|\delta|$.

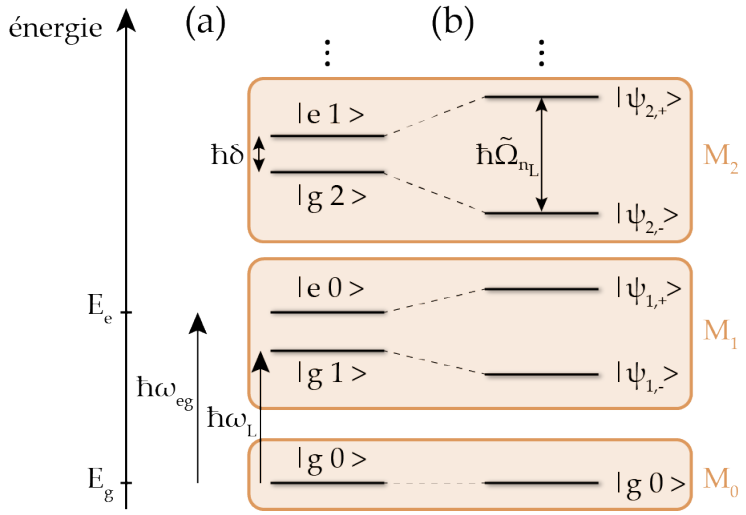


FIGURE 5.1 – **États énergétiques dans le formalisme de l'atome habillé.** Nous considérons un atome de fréquence de transition ω_{eg} entre les états fondamental $|g\rangle$ et excité $|e\rangle$ et un champ électromagnétique composé de n_L photons à la fréquence ω_L. (a) En l'absence de couplage entre ces deux, les atomes états non-couplés s'écrivent $|i\ n_L\rangle$ (où $i \equiv g, e$) et se regroupent en multiplicités M_{n_L} (cases orangées) pour de faibles désaccords $|\delta| << \omega_L, \omega_{eg}$. (b) Pour des intensités optiques non-nulles, les niveaux dans chaque multiplicité se couplent pour former les états propres couplés (ou habillés) $|\Psi_{n_L,\pm}\rangle$ séparés énergétiquement d'une quantité $\hbar\tilde{\Omega}_{n_L}$ (cf. texte).

Si nous considérons maintenant le couplage de l'atome avec le rayonnement électromagnétique, il faut prendre en compte le hamiltonien $\hat{\mathscr{H}}_{AF}$. A la position $\mathbf{r}$, nous pouvons écrire le hamiltonien de l'atome habillé avec le champ dans le mode L sous la forme :

$$\mathscr{H}(\hat{\mathbf{r}}) = \hbar(\omega_L - \delta)\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma} + \hbar\omega_L\hat{a}_L\hat{a}_L^\dagger - \mathbf{d}\cdot\left[\mathscr{E}_L^*(\hat{\mathbf{r}})\hat{\sigma}\hat{a}_L^\dagger + \mathscr{E}_L(\hat{\mathbf{r}})\hat{\sigma}^\dagger\hat{a}_L\right], \tag{5.6}$$

où $\delta = \omega_L - \omega_{eg}$ est le désaccord laser.

Nous évaluons les éléments de matrice de l'hamiltonien d'interaction :

$$\begin{aligned}\langle i\ n_L|\hat{\mathscr{H}}_{AF}|i'\ n_L'\rangle &= -\langle i\ n_L|\mathbf{d}\cdot\left[\mathscr{E}_L^*(\hat{\mathbf{r}})\hat{\sigma}\hat{a}_L^\dagger + \mathscr{E}_L(\hat{\mathbf{r}})\hat{\sigma}^\dagger\hat{a}_L\right]|i'\ n_L'\rangle \\ &= \frac{\hbar\Omega_R}{2}\left[\sqrt{n_L'}\langle i\ n_L|\hat{\sigma}|i'\ n_L'-1\rangle + \sqrt{n_L'+1}\langle i\ n_L|\hat{\sigma}^\dagger|i'\ n_L'+1\rangle\right] \\ &= \frac{\hbar\Omega_R}{2}\left[\sqrt{n_L'}\langle i\ n_L\mid g\rangle\langle e\mid i'\ n_L'-1\rangle + \sqrt{n_L'+1}\langle i\ n_L\mid e\rangle\langle g\mid i'\ n_L'+1\rangle\right], \end{aligned}\tag{5.7}$$

où nous notons $\Omega_R = -2\langle e|\mathbf{d}\cdot\mathscr{E}_L|g\rangle/\hbar$ la fréquence de Rabi du laser. Nous constatons que ces éléments sont non nuls si et seulement si $i = g$ et $i' = e$ ou si $i = e$ et $i' = g$ avec respectivement $n_L' = n_L \pm 1$. Ainsi, à l'intérieur de la multiplicité M_{n_L} il existe un couplage entre les états $|g\ n_L\rangle$ et $|e\ n_L - 1\rangle$ décrit par l'élément de matrice $\langle g\ n_L|\hat{\mathscr{H}}_{AF}|e\ n_L - 1\rangle = \sqrt{n_L}\hbar\Omega_R/2$.

Nous cherchons à calculer les énergies propres du système considéré ici, autrement dit, il nous faut diagonaliser le hamiltonien (5.6), ce qui n'est pas possible de manière exacte. Ainsi nous allons nous placer dans une multiplicité M_{n_L} afin de diagonaliser le hamiltonien dans le sous-espace propre associé. Cela est valable si $|\delta| \ll \omega_L$, ce qui signifie que nous négligeons les couplages non-résonants entre des niveaux de multiplicité différente. A l'intérieur d'une multiplicité M_{n_L} nous avons le hamiltonien suivant :

$$\hat{\mathscr{H}} = \hbar \begin{pmatrix} n_L \omega_L & \frac{\Omega_R}{2}\sqrt{n_L} \\ \frac{\Omega_R}{2}\sqrt{n_L} & n_L\omega_L - \delta \end{pmatrix}. \tag{5.8}$$

En posant la fréquence de Rabi généralisée $\tilde{\Omega}_{n_L} = \sqrt{n_L \Omega_R^2 + \delta^2}$, les énergies propres de cet hamiltonien se calculent facilement et valent

$$E_{n_L,\pm} = \hbar\left(\omega_L n_L - \frac{\delta}{2} \pm \frac{\tilde{\Omega}_{n_L}}{2}\right), \tag{5.9}$$

auxquelles on associe les états propres suivants :

$$|\Psi_{n_L,+}\rangle = \cos\theta_n |g\ n_L\rangle + \sin\theta_{n_L} |e\ n_L - 1\rangle, \tag{5.10a}$$
$$|\Psi_{n_L,-}\rangle = -\sin\theta_{n_L} |g\ n_L\rangle + \cos\theta_{n_L} |e\ n_L - 1\rangle, \tag{5.10b}$$

avec θ_{n_L} l'ange de mélange tel que $\tan 2\theta_{n_L} = -\Omega_R\sqrt{n_L}/\delta$ [Dalibard, 2013]. Nous schématisons en Fig.5.1(b) les états couplés (5.10) lorsque nous prenons en compte le couplage. L'écart entre deux niveaux d'une même multiplicité est donné par la fréquence de Rabi généralisée et vaut $\hbar\tilde{\Omega}_{n_L}$ et dépend directement de la racine carrée de l'intensité du laser.

Nous reportons en Fig.5.2 l'évolution des énergies propres (5.9) en fonction du désaccord laser δ pour quelques états propres. Nous observons le passage adiabatique d'un état à l'autre au sein d'une même multiplicité M_{n_L} lorsque la fréquence du laser est modifiée. Pour $\delta = 0$, où les deux états non-couplés se croisent, l'écart entre les énergies propres est donnée par la fréquence de Rabi Ω_R et le nombre de photons dans le mode laser.

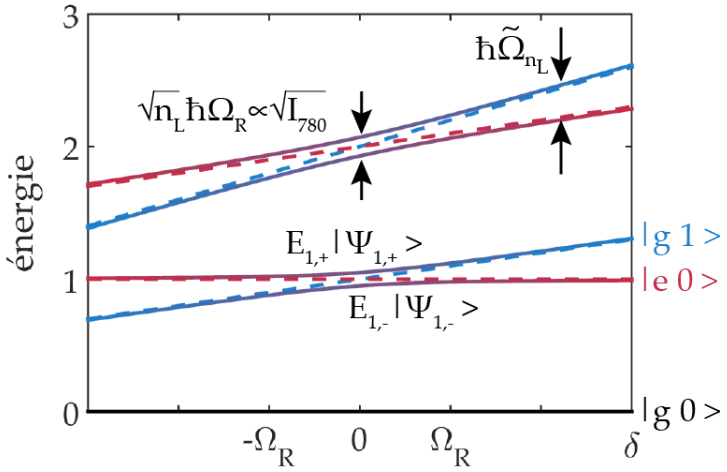


FIGURE 5.2 – **Évolution des énergies propres dans le formalisme de l'état habillé en fonction de la fréquence de Rabi.** Dans le formalisme de l'atome habillé, l'atome passe adiabatiquement de l'état propre $|g\ n_L + 1\rangle$ (trait pointillé bleu) à l'état $|e\ n_L\rangle$ (trait pointillé rouge). Ces derniers se couplent pour donner les nouveaux états propres couplés $|\Psi_{n_L,\pm}\rangle$ auxquels sont associés les énergies propres $E_{n_L,\pm}$ (trait plein dégradé) séparés de la quantité $\hbar\tilde{\Omega}_{n_L}$. A résonance ($\delta = 0$), les niveaux non-couplés se croisent et les énergies propres sont séparés de la quantité $\sqrt{n_L}\hbar\Omega_R$.

Après avoir introduit ce formalisme de l'atome "habillé" par le champ, nous expliquons à présent les étapes de notre méthode de piégeage.

5.2 Méthode de piégeage

5.2.1 Piégeage transversal : barrière de potentiel

Comme nous l'avons brièvement expliqué en fin de Chapitre 1, la méthode de piégeage utilise deux faisceaux lasers. Un premier à 1529.34 nm est utilisé pour satisfaire la condition de résonance plasmonique afin de moduler l'état excité (cf. Chapitre 3). Cette étape est schématisée en Fig.5.3(a), où nous simplifions volontairement le profil spatial des niveaux énergétiques (linéarisation spatiale des profils) pour une meilleure compréhension. Nous rappelons que l'état 5S n'est que très faiblement affecté par ce laser étant donné sa fréquence par rapport à la transition 5S-5P.

Le second laser, proche de la transition 5S → 5P (~ 780 nm), permet de coupler les deux états et crée une barrière de potentiel à résonance. En effet, comme nous l'avons expliqué dans la partie précédente, l'atome est habillé par le champ électromagnétique et passe de l'état 5S à l'état 5P de manière adiabatique. Par ailleurs, sur la Fig.5.3(b) nous constatons qu'une augmentation de la pente décroissante de l'état excité 5P permet un meilleur confinement de l'atome, résultant en un piégeage plus efficace.

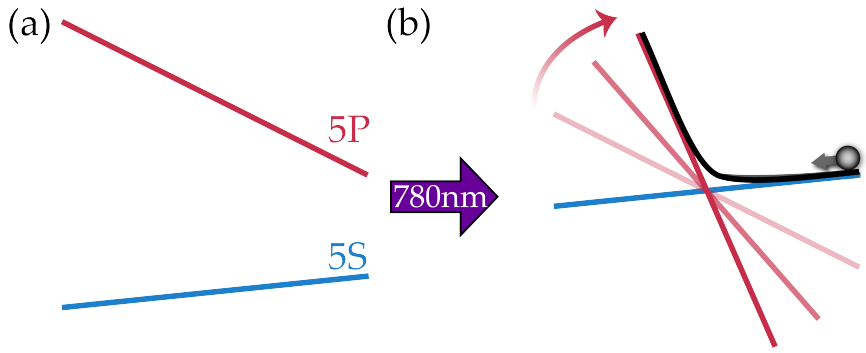


FIGURE 5.3 – **Schéma de principe du piégegage transversal.** (a) L'excitation plasmonique par un laser à 1529 nm permet de créer un profil spatial décroissant pour l'état excité 5P (rouge) tandis que l'état fondamental 5S (bleu) est principalement décalé par les forces de CP. (b) Le second laser à 780 nm permet de coupler les états afin de générer la barrière de potentiel pour piéger les atomes. Le potentiel de piégeage (noir) permet un meilleur confinement des atomes lorsque la pente de l'état excité est plus intense. Sur ce schéma, l'intensité du 5P serait augmentée et la fréquence du 780nm serait également modifiée, afin de faire correspondre le croisement entre les états 5P des différentes configurations (traits rouges).

Cette méthode permet de piéger les atomes transversalement (*i.e.*, selon (Oz)). Les atomes se déplacent alors dans un plan 2D parallèle à la surface. Comme nous allons l'expliquer ci-dessous, pour créer un réseau nous tirons profit des forces du vide.

5.2.2 Piégeage longitudinal : modulation CP

Structurer la surface permet d'imprimer un réseau sur le potentiel de piégeage. En effet, l'interaction CP entre l'atome et la structure engendre un décalage énergétique de l'état 5S plus important au-dessus d'une arrête qu'au-dessus d'une fente [González-Tudela et al., 2015]. Comme le résume la Fig.5.4, cela créée une modulation du potentiel de piégeage dans la direction longitudinale (Ox) avec une période égale à celle de la structure. Le piégeage transversal est toujours réalisé *via* la barrière de potentiel.

Cette méthode peut se généraliser dans le cas d'une structure périodique à 2D (e.g., avec des piliers) qui permettrait de créer un réseau avec des atomes piégés au-dessus de chaque pilier.

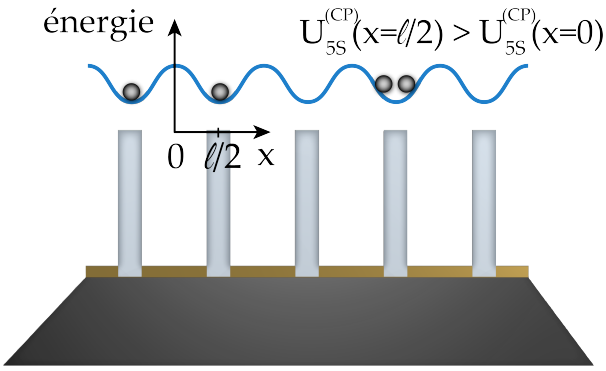


FIGURE 5.4 – **Schéma de principe du piégeage longitudinal à une dimension.** L'énergie d'interaction entre l'atome et la structure est plus importante au-dessus d'une arrête ($x = \ell/2$) qu'au-dessus d'une fente ($x = 0$). Cette variation spatiale du potentiel CP de l'état fondamental 5S (bleu) entraîne une modulation du potentiel total de période identique au réseau (ℓ). Les atomes sont alors piégés au-dessus des arrêtes du réseau 1D.

5.3 Potentiel de piégeage

Nous allons à présent expliquer le calcul du potentiel de piégeage. Pour cela nous présentons brièvement les équations de Bloch optiques qui décrivent la dynamique interne du système et qui nous serviront dans les calculs.

5.3.1 Équations de Bloch optiques

Les évolutions des populations et de la cohérence de l'atome sont déterminées à partir des équations de Bloch optiques. L'atome est décrit par un opérateur matrice densité $\hat{\rho}$ qui obéit à l'équation d'évolution suivante :

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{\mathscr{H}}, \hat{\rho}\right] + \mathscr{L}_{\mathrm{R}}\hat{\rho}, \tag{5.11}$$

où $\mathscr{L}_{\mathrm{R}}\hat{\rho}$ est l'opérateur de Lindblad. Ce terme prend en compte la relaxation de l'atome avec le réservoir [Breuer and Petruccione, 2002].

D'après la section 5.1, en prenant l'état fondamental comme l'origine des énergies, le hamiltonien est

$$\hat{\mathscr{H}} = \hbar\begin{pmatrix} \omega_0 & \frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}e^{-i\omega_{\mathrm{L}}t} \\ \frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}e^{i\omega_{\mathrm{L}}t} & 0 \end{pmatrix}. \tag{5.12}$$

Ainsi le commutateur de (5.11) vaut

$$\begin{aligned}\left[\hat{\mathscr{H}}, \hat{\rho}\right] &= \hat{\mathscr{H}}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{\mathscr{H}} \\ &= \hbar\begin{pmatrix} \frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}\left(\rho_{ge}e^{-i\omega_{\mathrm{L}}t} - \rho_{eg}e^{i\omega_{\mathrm{L}}t}\right) & \rho_{eg}\omega_0 + \frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}e^{-i\omega_{\mathrm{L}}t}\left(\rho_{gg} - \rho_{ee}\right) \\ \frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}e^{i\omega t}\left(\rho_{ee} - \rho_{gg}\right) - \rho_{ge}\omega_0 & \frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}\left(\rho_{eg}e^{i\omega_{\mathrm{L}}t} - \rho_{ge}e^{-i\omega_{\mathrm{L}}t}\right) \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Nous éliminons la dépendance temporelle en posant

$$\begin{cases} \tilde{\rho}_{eg} = \rho_{eg}e^{i\omega_{\mathrm{L}}t}, \\ \tilde{\rho}_{ge} = \rho_{ge}e^{-i\omega_{\mathrm{L}}t}, \end{cases} \tag{5.13}$$

i.e., en se plaçant dans le référentiel tournant à la fréquence laser ω_{L}. Le commutateur peut alors se simplifier sous la forme suivante :

$$\left[\hat{\mathscr{H}}, \hat{\rho}\right] = \hbar\begin{pmatrix} \frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}\left(\tilde{\rho}_{ge} - \tilde{\rho}_{eg}\right) & \tilde{\rho}_{eg}e^{-i\omega_{\mathrm{L}}t}\omega_0 + \frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}e^{-i\omega_{\mathrm{L}}t}\left(\rho_{gg} - \rho_{ee}\right) \\ \frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}e^{i\omega_{\mathrm{L}}t}\left(\rho_{ee} - \rho_{gg}\right) - \tilde{\rho}_{ge}e^{i\omega_{\mathrm{L}}t}\omega_0 & \frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}\left(\tilde{\rho}_{eg} - \tilde{\rho}_{ge}\right) \end{pmatrix}. \tag{5.14}$$

Par ailleurs les termes de relaxation sont donnés par

$$\{\mathscr{L}_{\mathrm{R}}\hat{\rho}\}_{gg} = \Gamma\rho_{ee}, \tag{5.15a}$$
$$\{\mathscr{L}_{\mathrm{R}}\hat{\rho}\}_{ee} = -\Gamma\rho_{ee}, \tag{5.15b}$$
$$\{\mathscr{L}_{\mathrm{R}}\hat{\rho}\}_{eg} = -\frac{\Gamma}{2}\rho_{eg}, \tag{5.15c}$$
$$\{\mathscr{L}_{\mathrm{R}}\hat{\rho}\}_{ge} = -\frac{\Gamma}{2}\rho_{ge}. \tag{5.15d}$$

Ainsi, d'après l'équation d'évolution (5.11), nous obtenons le système d'équations suivant :

$$\dot{\rho}_{ee} = i\frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}\left(\tilde{\rho}_{eg} - \tilde{\rho}_{ge}\right) - \Gamma\rho_{ee}, \tag{5.16a}$$
$$\dot{\rho}_{gg} = -i\frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}\left(\tilde{\rho}_{eg} - \tilde{\rho}_{ge}\right) + \Gamma\rho_{ee}, \tag{5.16b}$$
$$\dot{\tilde{\rho}}_{eg} = i\delta\tilde{\rho}_{eg} + i\frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}\left(\rho_{ee} - \rho_{gg}\right) - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{eg}, \tag{5.16c}$$
$$\dot{\tilde{\rho}}_{ge} = -i\delta\tilde{\rho}_{ge} - i\frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}\left(\rho_{ee} - \rho_{gg}\right) - \frac{\Gamma}{2}\tilde{\rho}_{ge}, \tag{5.16d}$$

où nous rappelons que $\delta = \omega_{\mathrm{L}} - \omega_{eg}$.

Finalement, en notant que $\tilde{\rho}_{eg} = \tilde{\rho}^{*}_{ge}$, nous arrivons au système d'équations suivant :

$$\dot{\rho}_{ee} = -i\frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}\left(\tilde{\rho}_{ge} - \tilde{\rho}^{*}_{ge}\right) - \Gamma\rho_{ee}, \tag{5.17a}$$
$$\dot{\tilde{\rho}}_{ge} = -\left(i\delta + \frac{\Gamma}{2}\right)\tilde{\rho}_{ge} - i\frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}\left(\rho_{ee} - \rho_{gg}\right). \tag{5.17b}$$

Solutions en régime stationnaire

Dans le régime stationnaire, toutes les dérivées temporelles sont nulles, le système (5.17) s'écrit alors

$$0 = -i\frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}\left(\rho^{st}_{ge} - \rho^{st\,*}_{ge}\right) - \Gamma\rho^{st}_{ee}, \tag{5.18a}$$
$$0 = -\left(i\delta + \frac{\Gamma}{2}\right)\rho^{st}_{ge} - i\frac{\Omega_{\mathrm{R}}}{2}\left(\rho^{st}_{ee} - \rho^{st}_{gg}\right). \tag{5.18b}$$

En réarrangeant les équations de ce système, nous montrons que les solutions se mettent sous la forme

$$\rho^{st}_{ee}(z) = \frac{\Omega_{\mathrm{R}}^2}{\Gamma(z)^2 + 4\delta(z)^2 + 2\Omega_{\mathrm{R}}^2}, \tag{5.19a}$$
$$\rho^{st}_{ge}(z) = \frac{\Omega_{\mathrm{R}}\left[2\delta(z) + i\Gamma(z)\right]}{\Gamma(z)^2 + 4\delta(z)^2 + 2\Omega_{\mathrm{R}}^2}, \tag{5.19b}$$

où nous avons utilisé la propriété de conservation de la population totale : $\rho_{gg} + \rho_{ee} = 1$; valable pour un système fermé.

La densité de modes étant affectée par la surface, nous considérons pour le moment le cas où le taux d'émission spontanée Γ dépend de la position de l'atome z.

5.3.2 Force de piégeage

Nous considérons un atome de ^{87}Rb dans son état fondamental à la position z [1] en champ proche de la surface plane et stratifiée optimisée précédemment (cf. Chapitre 3). En l'absence de champ extérieur, l'énergie interne atomique est donnée par le potentiel CP, déterminé au Chapitre 4, soit

$$U(z) = U_{5S}^{(CP)}(z). \tag{5.20}$$

Nous reportons en Fig.5.5(a) les potentiels CP des états fondamental et excité correspondants. L'énergie de l'atome correspond donc à la courbe d'énergie bleue. Comme nous l'avons vu au chapitre précédent, l'atome suit ce potentiel et s'écrase sur la surface.

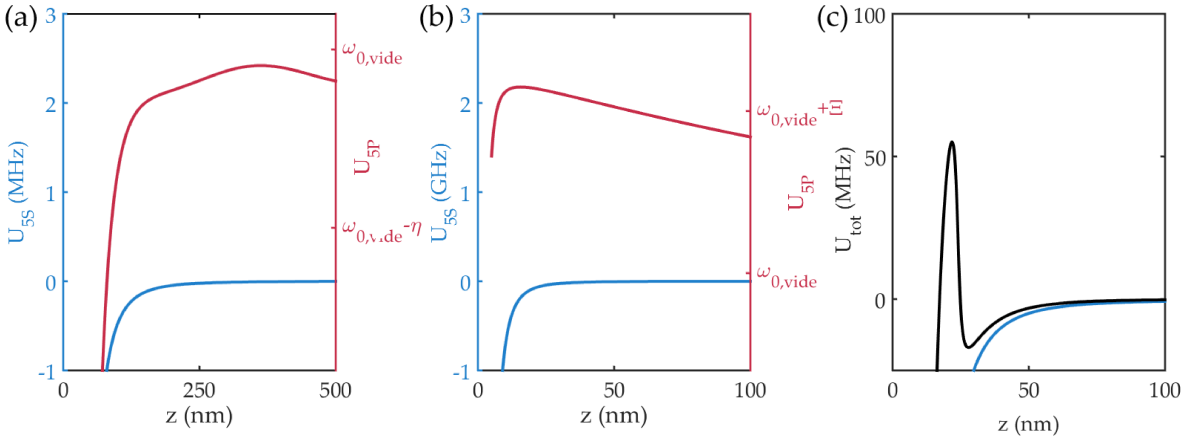


FIGURE 5.5 – **Tracés des potentiels d'interaction entre l'atome et la structure en fonction de la distance z.** (a) Potentiels énergétiques CP des états 5S (bleu) et 5P (rouge) d'un atome de ^{87}Rb à la position z de la surface stratifiée. Le potentiel $U_{5P}(z)$ est exprimé en $\omega_{0,vide}$ qui correspond à la fréquence de la transition atomique 5S → 5P dans le vide (*i.e.*, $\omega_{0,vide} = 2\pi\cdot 384.230$ THz). Ici $\eta = 5$ MHz. (b) Potentiels (optiques+CP) des états 5S (bleu) et 5P (rouge) lorsque le laser à 1529 nm (rose, voir *inset*) est envoyé sur la structure, avec $I_{1529} = 4.8\ \mu W/\mu m^2$. Ici $\Xi = 20$ GHz. (c) Lorsque le laser à 780 nm est ajouté (en violet dans l'*inset*), une barrière de potentiel de hauteur U_b est créée dans le potentiel total (trait plein noir) à la position z_b. La profondeur du piège est définie par U_0. Les paramètres du 780 sont $\Omega_R = 2\pi\cdot 132$ MHz et $\delta_0 = 2\pi\cdot 22.65$ GHz.

Nous ajoutons à présent le laser à la longueur d'onde $\lambda_{1529} = 1529.34$ nm avec un certain angle afin d'obtenir la résonance plasmonique (cf. Chapitre 3). Le champ électrique induit une modification des niveaux énergies par effet Stark telle que

$$U_{5S}(z) = U_{5S}^{(CP)}(z) + U_{5S}^{opt}(z), \tag{5.21}$$

$$U_{5P}(z) = U_{5P}^{(CP)}(z) + U_{5P}^{opt}(z). \tag{5.22}$$

Nous rappelons que les potentiels optiques sont donnés par

$$U_n^{opt}(z) = \beta^{opt}(n;\omega_L)\, I(z), \tag{5.23}$$

où $\beta^{opt}(n;\omega_L)$ est un préfixe qui détermine la manière dont est décalé le niveau énergétique n ($\equiv |F\ m_F\rangle$ ou $|J\ m_J\rangle$ selon le régime d'intensité considéré) par le champ laser à la fréquence ω_L. Ce préfixe a été calculé dans le Chapitre 3, et d'après les relations (3.52) et (3.58), il est donné par

$$\beta^{opt}(n;\omega_L) = \begin{cases} -\dfrac{1}{2\varepsilon_0 c}\left[\dfrac{1}{2}\alpha^{(0)}(F;\omega_L) + \dfrac{1}{2}\alpha^{(2)}(F;\omega_L)\left(\dfrac{3m_F^2 - F(F+1)}{F(2F-1)}\right)\right] & \text{en champ faible,} \quad (5.24a) \\ -\dfrac{1}{2\varepsilon_0 c}\left[\dfrac{1}{2}\alpha^{(0)}(J;\omega_L) + \dfrac{1}{2}\alpha^{(2)}(J;\omega_L)\left(\dfrac{3m_J^2 - J(J+1)}{J(2J-1)}\right)\right] & \text{en champ fort.} \quad (5.24b) \end{cases}$$

1. Le potentiel étant invariant par translation selon (Ox) dans le cas de la surface plane, nous fixons $x = 0$.

Nous avons ici utilisé la définition suivante : $2\varepsilon_0 c|\mathrm{E}_z|^2 = \mathrm{I}$, où nous notons I l'intensité du champ électromagnétique. Étant donné que le laser est fixé à une longueur d'onde $\lambda_{1529} = 1529.34$ nm, *i.e.*, faiblement désaccordé la transition atomique $5\mathrm{P}_{3/2} \rightarrow 4\mathrm{D}_{5/2}$ (= 1529.366 nm), le déplacement lumineux induit par le laser sur l'état 5S est négligeable : $\beta^{opt}(5\mathrm{P};\omega_{1529}) \gg \beta^{opt}(5\mathrm{S};\omega_{1529})$ [2].

Nous considérons un laser avec une puissance $\mathrm{P}_{1529} = 300$ mW et un rayon $w_0 = 200$ µm, ce qui donne une intensité $\mathrm{I}_{1529} \simeq 4.8\times10^6$ W/m^2. Dans ce régime d'intensité, nous calculons les déplacements énergétiques par effet Stark en considérant le préfixe (5.24b), déterminé dans l'approximation des champs forts. Cela se justifie d'autant plus que la résonance plasmonique entraîne une augmentation de l'intensité de près d'un facteur 100 à l'interface. Nous atteignons par exemple $\mathrm{I}_{1529,\mathrm{SP}} = 3.7\times10^8$ W/m^2 pour $z = 50$ nm. Nous prenons de manière arbitraire l'état pour lequel $m_\mathrm{J} = m_\mathrm{I} = 1/2$. Le décalage optique induit par le laser sur les états atomiques se rajoute aux potentiels CP et engendre une forte modulation de l'état excité qui prend la forme du profil d'intensité, *i.e.*, évanescent. Cela s'observe en Fig.5.5(b), où nous avons tracé les potentiels totaux (5.21) et (5.22). Proche de la surface, l'interaction CP l'emporte sur l'interaction optique, ce qui explique ce rebond dans l'énergie de l'état 5P puis cette chute d'énergie quand $z \rightarrow 0$.

Avec ce premier habillage, la fréquence de transition entre les états fondamental et excité dépend de la position z. Elle est donnée par

$$\omega_0(z) = \mathrm{U}_{5\mathrm{P}}(z) - \mathrm{U}_{5\mathrm{S}}(z). \tag{5.25}$$

A ce stade, l'atome est toujours dans l'état fondamental. L'énergie totale est donc donnée par l'énergie du niveau 5S (courbe bleue), soit

$$\mathrm{U}(z) = \mathrm{U}_{5\mathrm{S}}^{(\mathrm{CP})}(z) + \mathrm{U}_{5\mathrm{S}}^{opt}(z). \tag{5.26}$$

Comme nous le constatons, l'atome est toujours attiré par la surface. Pour remédier à cela, nous ajoutons un deuxième laser à une fréquence ω_{780}, légèrement désaccordé de la transition $5\mathrm{S}_{1/2} \rightarrow 5\mathrm{P}_{3/2}$ (= 780.241 nm). Nous définissons ce désaccord par

$$\delta(z) = \omega_{780} - \omega_0(z). \tag{5.27}$$

L'opérateur force dipolaire qui s'exerce alors sur l'atome est donné par la dérivée temporelle de l'impulsion atomique [Dalibard and Cohen-Tannoudji, 1985] :

$$\hat{\mathbf{F}} = \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{\mathscr{H}}, \hat{\mathbf{p}}\right] = -\nabla_{\hat{\mathbf{R}}}\hat{\mathscr{H}} = -\nabla_{\hat{\mathbf{R}}}\hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{AF}}. \tag{5.28}$$

où $\hat{\mathbf{R}}$ est l'opérateur position de l'atome.

Nous nous intéressons ici à la force moyennée sur les états habillés (base couplée $|i\ n_\mathrm{L}\rangle$), soit

$$\mathbf{f}(\hat{\mathbf{r}}) = \langle \mathbf{F}(\langle\hat{\mathbf{R}}\rangle)\rangle, \tag{5.29}$$

où nous avons remplacé l'opérateur position par sa valeur moyenne $\langle\hat{\mathbf{R}}\rangle = \hat{\mathbf{r}}$. Nous avons donc, d'après le dernier terme de l'équation (5.6) qui correspond à l'hamiltonien d'interaction,

$$\begin{aligned}\mathbf{f}(\hat{\mathbf{r}}) &= \langle \nabla_{\hat{\mathbf{r}}}\left[\mathbf{d}\cdot\mathscr{E}_\mathrm{L}^*(\hat{\mathbf{r}})\right]\hat{\sigma}\,\hat{a}_\mathrm{L}^\dagger + \nabla_{\hat{\mathbf{r}}}\left[\mathbf{d}\cdot\mathscr{E}_\mathrm{L}(\hat{\mathbf{r}})\right]\hat{\sigma}^\dagger\,\hat{a}_\mathrm{L}\rangle \\ &= -\frac{\hbar}{2}\nabla_{\hat{\mathbf{r}}}\Omega_\mathrm{R}\left[\rho_{eg} + \rho_{ge}\right],\end{aligned} \tag{5.30}$$

avec $\rho_{eg} = \langle e\ n_\mathrm{L} - 1|\hat{\rho}|g\ n_\mathrm{L}\rangle = \rho_{ge}^*$. Ce terme traduit la cohérence entre les niveaux fondamental et excité (cf. section précédente).

2. Ce décalage reste tout de même pris en compte dans les simulations numériques.

Pour un atome dans un état propre de la base couplée $|\Psi_{n,\pm}\rangle$, la force est donnée par $\mathbf{f}_\pm = -\nabla_{\hat{\mathbf{r}}} E_{n,\pm} = \mp\nabla_{\hat{\mathbf{r}}} E_{n,+}$. Dans le cas de la simulation, nous ne sommes pas dans un état de Fock du nombre de photons mais dans un état cohérent (laser) possédant un nombre moyen de photons très élevés ($\langle n_L \rangle \gg 1$). Dans de telles conditions, les états de Fock entrant dans la décomposition de l'état cohérent ont des nombres de photons proches de n_L en relatif et nous pouvons négliger les différences de couplage entre les états de différent n_L, ainsi $\mathbf{f}_\pm$ est la même pour tous les états $|\Psi_{n,\pm}\rangle$.

La force dipolaire est alors donnée par [Dalibard and Cohen-Tannoudji, 1985]

$$\mathbf{f}_{dip}(\hat{\mathbf{r}}) = \rho_+ \mathbf{f}_+ = -\frac{dU_{5P}}{dz}\rho_{ee}(z)\hat{\mathbf{z}} - \frac{dU_{5S}}{dz}\rho_{gg}(z)\hat{\mathbf{z}}, \tag{5.31}$$

où $\rho_{ee}(z)$ et $\rho_{gg}(z) = 1 - \rho_{ee}(z)$ sont les populations des états excité et fondamental. Nous considérons ici un atome se déplaçant lentement par rapport à la dynamique interne du système. Les populations sont alors données dans le régime stationnaire à partir de (5.19a).

Le travail à fournir à l'atome pour qu'il se déplace d'une quantité $d\mathbf{r}$ vaut

$$dW = -\mathbf{f}_{dip} \cdot d\mathbf{r}. \tag{5.32}$$

Si nous considérons un atome se déplaçant dans la direction $-z$ alors le potentiel final s'écrit

$$U_{tot}(z) = \int_\infty^z dW = -\int_\infty^z \left(\frac{dU_{5P}}{dz'}\rho_{ee}(z') + \frac{dU_{5S}}{dz'}\rho_{gg}(z') \right) dz', \tag{5.33}$$

D'autre part on peut montrer qu'un terme supplémentaire dans l'expression de la force (5.28) dû à l'émission spontanée (non-inclus ici) donne une composante nulle en moyenne [Chang et al., 2014] mais résulte en un terme de chauffage supplémentaire que nous détaillerons en section 5.4.8.

L'équation (5.33) nous montre que le potentiel total est obtenu en intégrant la force s'appliquant sur l'atome depuis un régime d'interaction nulle ($z = \infty$). Celle-ci s'obtient en pondérant les forces appliquées sur chacun des états 5S et 5P par leur probabilité de présence ρ_{gg} et ρ_{ee} (respectivement). Nous présentons en Fig.5.5(c) le potentiel total (courbe noire) dû au couplage des états 5S et 5P par le laser à 780 nm. Dans ces simulations, ce laser est fixé à une longueur d'onde $\lambda_{780} = 780.195$ nm, soit $\delta_0 = \omega_{780} - \omega_{0,vide} = 2\pi \cdot 22.65$ GHz. La puissance vaut $P_{780} = 1$ mW pour un rayon $w_0 = 200$ µm, ce qui donne $I_{780} \simeq 1.6$ W/m^2, soit encore une fréquence de Rabi $\Omega_R \simeq 2\pi \cdot 132$ MHz. Par simplicité, nous négligeons ici les variations spatiales de l'intensité du 780, par conséquent nous avons une fréquence de Rabi constante sur tout l'espace. Nous remarquons par ailleurs une rechute du potentiel total après l'anticroisement des états (lorsque $z \to 0$). Cela s'explique par les termes de relaxation qui le font converger à nouveau vers l'état fondamental.

5.4 Caractérisation du piège longitudinal

5.4.1 Notations

Tout d'abord nous introduisons les notations qui nous serviront pour la caractérisation du piège.

La position z_b, correspondant à la position de la résonance du laser à 780 nm, est définie par la condition suivante :

$$\delta(z_b) = \omega_{780} - \omega_0(z_b) = 0. \tag{5.34}$$

Elle est notée z_b car elle correspond à la position de la barrière de potentiel.

Un piège est alors créé à la position z_t tel que

$$U_{tot}(z_t) = U_{min}. \tag{5.35}$$

En notant $U_{max} = U_{tot}(z_b)$ la valeur du maximum de la barrière, nous définissons la hauteur de la barrière par $U_b = U_{max} - U_{min}$. La profondeur du piège est calculée selon les deux configurations possibles :

- si $U_{max} > 0$ alors la profondeur du piège est déterminé par U_{min}, soit $U_0 = |U_{min}|$.

- si $U_{max} < 0$ alors la barrière de potentiel de hauteur U_b fixe la profondeur du piège telle que $U_0 = U_b$.

5.4.2 Influence des paramètres expérimentaux sur la géométrie

Avec cette méthode nous avons à disposition trois paramètres expérimentaux avec lesquels nous pouvons agir sur le piège : les intensités des deux lasers (1529 et 780 nm) ainsi que la fréquence du laser à 780 nm. Nous présentons en Fig.5.6 leur influence sur la géométrie du piège. Dans un premier temps nous reportons la position du piège z_t en balayant simultanément la puissance du laser utilisée pour la résonance plasmonique (1529 nm) et la fréquence du laser à 780 nm (cf. Fig.5.6(a)). Puis en Fig.5.6(b) et (c) nous présentons l'évolution de la position z_t et de la profondeur U_0, respectivement, en fonction des paramètres du 780 (désaccord et puissance). Nous constatons qu'en augmentant les intensités optiques, il est possible d'éloigner les atomes de la structure et/ou d'augmenter la profondeur du piège. Les paramètres des lasers constituent donc des degrés de liberté avec lesquels il est possible d'agir sur la géométrie et la position du piège.

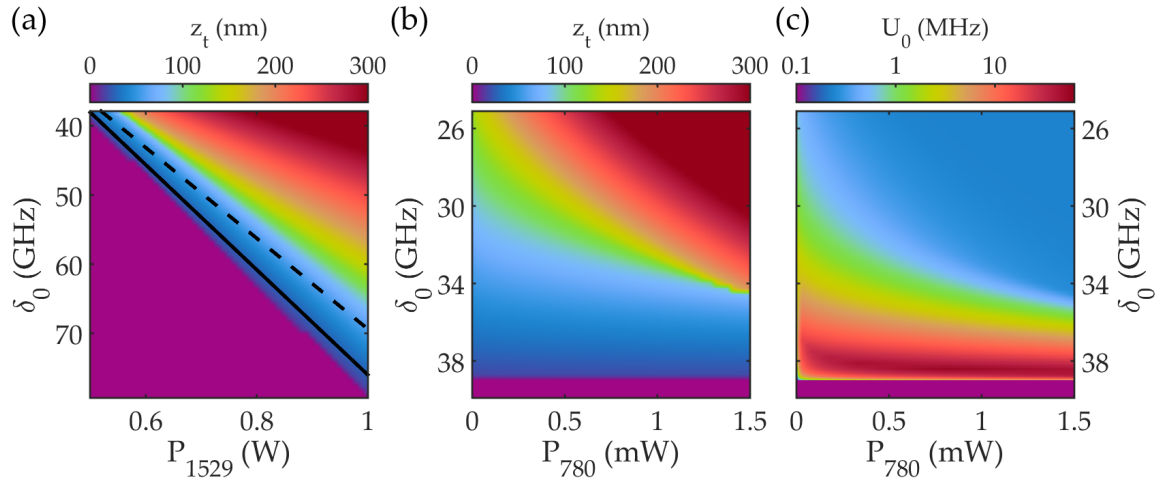


FIGURE 5.6 – **Influence des paramètres expérimentaux sur la géométrie du piégeage transversal.** Position du piège z_t en fonction de la fréquence du 780 (où l'on rappelle que $\delta_0 = \omega_{780} - \omega_{0,vide}$) et des puissances optiques des lasers (a) à 1529 nm et (b) à 780 nm. (c) Profondeur du piège U_0 en fonction des paramètres du laser 780 : fréquence et puissance. Les lignes pleine et tiretée correspondent aux positions respectives $z_t = 25$ et $z_t = 50$ nm qui seront celles utilisées pour le calcul des temps caractéristiques. Dans ces simulations nous prenons : (a) $P_{780} = 1.5$ mW ($\Omega_R = 162$ MHz), (b)-(c) $P_{1529} = 0.5$ W.

Nous allons maintenant caractériser la dynamique du potentiel de piégeage transverse obtenu.

5.4.3 Fonction d'onde et énergie de l'état fondamental

Pour déterminer l'énergie et la fonction d'onde de l'état fondamental du piège, nous remplaçons dans un premier temps le potentiel total $U(z)$ (métastable) en un potentiel stable $U_s(z)$ tel que

$$U_s(z) = \begin{cases} U(z) \text{ pour } z > z_b, \\ U_{max} \text{ pour } z < z_b, \end{cases} \tag{5.36}$$

où nous rappelons que z_b est la position de la barrière et où $U_{max} = U(z_b)$. Le schéma de ce potentiel est présenté en Fig.5.7.

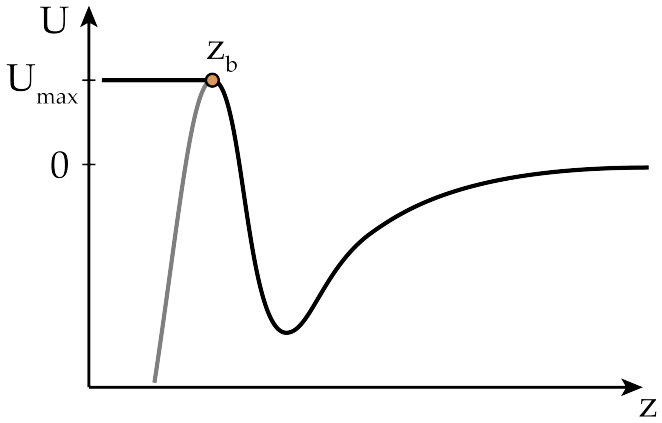


FIGURE 5.7 – **Profil du potentiel U_s utilisé pour déterminer la fonction d'onde et l'énergie de l'état fondamental.** La barrière métastable $U(z)$ (en gris) est transformée en un potentiel stable $U_s(z)$ (en noir) afin de calculer la fonction d'onde et l'énergie associées à l'état fondamental du piège.

Pour trouver l'énergie de l'état fondamental, nous utilisons la méthode de Propagation en Temps Imaginaires (ITP pour *Imaginary Time Propagation* en anglais). Celle-ci consiste à laisser évoluer le système en temps imaginaires, à partir de l'équation de Schrödinger [Bader et al., 2013]. La solution correspondante tend alors vers l'état fondamental du système.

Méthode de propagation en temps imaginaires

Nous considérons un hamiltonien $\hat{\mathscr{H}}$ dont les valeurs propres sont réelles, positives et non-dégénérées : $0 < E_0 < E_1 < ...$, auxquelles sont associées les fonctions propres Φ_n qui forment une base orthonormée. L'évolution d'un état $\Psi(x,t)$ est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \hat{\mathscr{H}}\Psi(x,t). \tag{5.37}$$

Le système est initialement défini dans l'état $\Psi(x,0) = \Psi_0(x)$. Si nous posons maintenant le temps imaginaire *via* une rotation de Wick tel que $\tau = it$ alors l'équation d'évolution (5.37) se réécrit

$$-\hbar\frac{\partial}{\partial \tau}\Psi(x,\tau) = \hat{\mathscr{H}}\Psi(x,\tau). \tag{5.38}$$

La solution est donc de la forme

$$\Psi(x,\tau) = e^{-\tau\hat{\mathscr{H}}/\hbar}\Psi_0(x). \tag{5.39}$$

En notant que la solution initiale peut s'écrire dans la base des fonctions propres de la manière suivante :

$$\Psi_0(x) = \sum_n c_n\Phi_n(x), \tag{5.40}$$

où les coefficients c_n sont donnés par $c_n = \langle\Phi_n(x)|\Psi_0(x)\rangle$.

Ainsi en utilisant l'expression (5.40), nous pouvons écrire les solutions (5.39) sous la forme

$$\Psi(x,\tau) = \sum_n e^{-\tau E_n/\hbar}c_n\Phi_n(x). \tag{5.41}$$

Nous observons que pour des temps imaginaires τ grands, nous avons

$$\Psi(x,\tau\to\infty) \;\to\; e^{-\tau E_0/\hbar}c_0\Phi_0(x). \tag{5.42}$$

En effet les autres termes exponentiels décroissent plus rapidement. En normalisant la valeur asymptotique (5.42) nous retrouvons la fonction d'onde fondamentale du système $\Phi_0(x)$ ainsi que l'énergie associée $E_0 = \langle\Psi_0(x)|\hat{\mathscr{H}}|\Psi_0(x)\rangle$.

Énergie de l'état fondamental

En se plaçant à une dimension, selon l'axe (Oz), nous avons le hamiltonien suivant :

$$\hat{\mathscr{H}} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \mathrm{U}_s(z), \tag{5.43}$$

où $\hat{p}_z = -i\hbar\partial_z$ et m sont la composante selon z de l'opérateur impulsion et la masse de l'atome, respectivement.

Par conséquent, d'après l'expression de (5.39), nous avons

$$\Psi(x,\tau) = \mathrm{e}^{-\tau\hat{\mathscr{H}}/\hbar}\Psi_0(x). \tag{5.44}$$

Au premier ordre le terme exponentiel devient

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{-\tau\hat{\mathscr{H}}/\hbar} &\approx \hat{1} - \frac{\tau}{\hbar}\hat{\mathscr{H}} \\ &= \hat{1} - \frac{\tau}{\hbar}\mathrm{U}_s(z) - \frac{\tau}{\hbar}\frac{\hat{p}_z^2}{2m} \\ &\approx \mathrm{e}^{-\tau\mathrm{U}_s(z)/\hbar} + \tau\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial_z^2},\end{aligned} \tag{5.45}$$

ainsi (5.44) se met sous la forme

$$\Psi(x,\tau) = \left[\mathrm{e}^{-\tau\mathrm{U}_s(z)/\hbar} + \tau\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial_z^2}\right]\Psi_0(x). \tag{5.46}$$

L'énergie moyenne associée à la fonction d'onde fondamentale est donnée par

$$\begin{aligned}\mathrm{E}_0 &= \int \Psi_0^*(z)\hat{\mathscr{H}}\Psi_0(z)dz \\ &= \int \Psi_0^*(z)\left[\mathrm{U}_s(z) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial_z^2}\right]\Psi_0(z)dz.\end{aligned} \tag{5.47}$$

Nous présentons en Fig.5.8(a) les résultats de convergence de l'énergie fondamentale, donnée par (5.47), en fonction du nombre d'itérations. Le potentiel de piégeage utilisé pour les simulations correspond à celui tracé en Fig.5.5(c). Un grand nombre d'itérations signifie de larges temps τ. Or nous avons vu que pour des temps infinis le système se retrouvait dans l'état fondamental (cf. relation (5.42)). Lorsque le résultat affiché diffère du résultat de l'itération précédente avec une erreur de 0.01%, nous estimons qu'il correspond uniquement à la fonction d'onde fondamentale Φ_0, et non à une superposition avec des états supérieurs. Nous obtenons ici une énergie de l'état fondamental égale à -11.93 MHz après 6000 itérations. Nous reportons également le module carré de la fonction d'onde associée en Fig.5.8(b) (courbe rouge).

Une fois la fonction d'onde de l'état fondamental du piège déterminée, nous pouvons également définir deux quantités supplémentaires : les extensions spatiale et d'impulsion de la particule, données respectivement par

$$\Delta z = \sqrt{\langle z^2\rangle - \langle z\rangle^2}, \tag{5.48a}$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}, \tag{5.48b}$$

où les valeurs moyennes sont définies telles que

$$\langle z\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz\Psi_0^*(z)z\Psi_0(x), \tag{5.49a}$$

$$\langle z^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz\Psi_0^*(z)z^2\Psi_0(x), \tag{5.49b}$$

$$\langle p\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} dz\Psi_0^*(z)\partial_z\Psi_0(x), \tag{5.49c}$$

$$\langle p^2\rangle = -\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty} dz\Psi_0^*(z)\partial_z^2\Psi_0(x). \tag{5.49d}$$

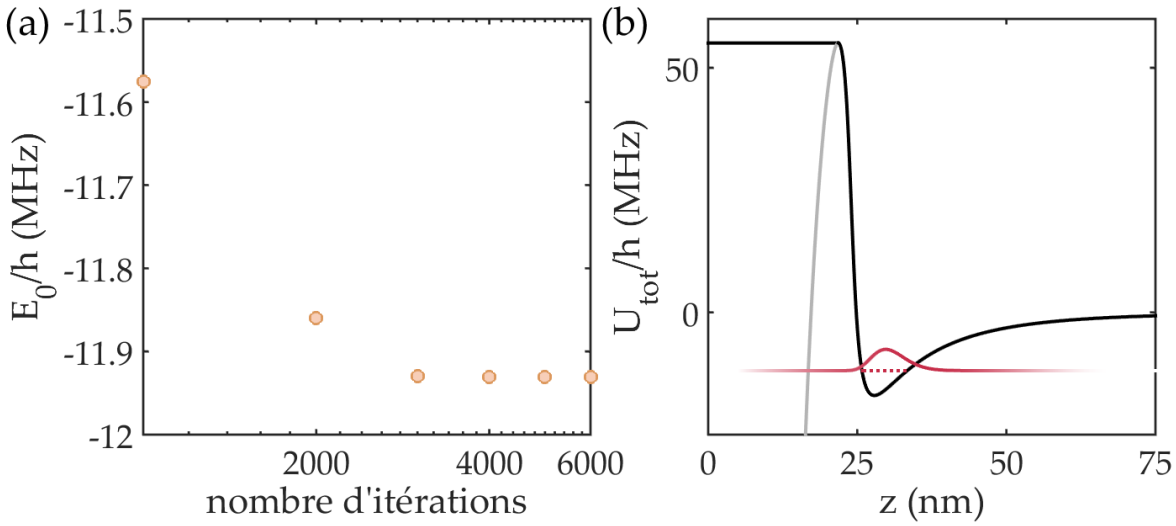


FIGURE 5.8 – **Convergence des calculs dans la méthode ITP et tracé de la fonction d'onde de l'état fondamental.** (a) Convergence des calculs de l'énergie fondamentale en fonction du nombre itérations dans la méthode ITP. (b) L'énergie fondamentale E_0 (trait pointillé rouge) est obtenue en considérant le potentiel $U_s(z)$ (noir), à laquelle est associé le module carré de la fonction d'onde de l'état fondamental $|\psi_0(z)|^2$ (trait plein rouge). Le trait gris correspond au potentiel total réel.

5.4.4 Condition d'adiabaticité

Nous pouvons introduire un temps caractéristique τ_{ad} qui correspond aux oscillations de l'atome dans le piège défini par

$$\tau_{ad} = \frac{m\Delta z}{\Delta p}, \tag{5.50}$$

où Δz et Δp ont été définis dans la section précédente (cf. (5.48)). Cette définition introduit une nouvelle échelle caractéristique de temps. Ce temps ne participe pas au temps de vie total dans le piège mais permet de s'assurer du transport adiabatique de l'atome dans le piège. En effet, le piège doit être mis en mouvement sur des temps supérieurs à τ_{ad} afin de respecter la condition d'adiabaticité.

En reprenant le cas précédent (cf. Fig.5.5), nous avons $\Delta z = 2.8$ nm et $\Delta p = 2.0\times10^{-26}$ kg.m/s, ce qui donne $\tau_{ad} \simeq 20$ ns. Le déplacement du piège doit alors se faire sur des temps bien supérieurs à la vingtaine de nanosecondes.

5.4.5 Taux de diffusion

Lors de l'étude des prérequis pour la conception de la nanostructure au Chapitre 2, nous avons vu que le taux d'émission spontanée d'un atome excité en champ proche pouvait être modifié. Cette évolution était donnée par la relation (3.22). Nous avions calculé l'influence d'un milieu semi-infini en or et nous avions vu que nous pouvions négliger les effets sur Γ_0 lorsque l'atome se trouvait à $z > 100$ nm. Dans les géométries obtenues (cas plan et structuré), le métal est positionné à une distance supérieure à 100 nm de l'atome (158 nm et 500 nm). De plus les couches métalliques sont fines (41 nm et 10 nm). Par ailleurs, la couche de diélectrique n'introduit aucun effet sur le taux Γ_0 car à la fréquence considérée ici (~ 780 nm) la partie imaginaire du SiO_2 est nulle [Palik, 1998], ainsi le terme (3.23) est nul également.

Par conséquent dans notre géométrie, nous négligeons les effets de la structure sur la modification de Γ, soit $\Gamma(z) \equiv \Gamma_0 = 2\pi \cdot 6.066$ MHz pour le ^{87}Rb.

5.4.6 Chauffage

Si l'atome est dans l'état excité, il peut émettre un photon spontanément. Le taux de diffusion dépend de la population de l'état excité ρ_{ee} à la position du piège z_t. Il correspond au nombre de photons diffusés spontanément par seconde, soit

$$\Gamma_d = \Gamma_0 \rho_{ee}(z_t). \tag{5.51}$$

A ce taux nous associons le temps de diffusion, simplement donné par

$$\tau_d = \Gamma_d^{-1} = \left(\Gamma_0 \rho_{ee}(z_t)\right)^{-1}, \tag{5.52}$$

qui correspond au temps au bout duquel un photon est émis spontanément.

L'habillage de l'atome par le laser modifie la quantité de mouvement emporté par le photon lors d'un processus d'émission spontanée. En effet, on peut montrer que cette impulsion est donnée par [Chang et al., 2014]

$$p_{eff} = \hbar k_{eff}, \tag{5.53}$$

où $k_{eff} = \sqrt{2/5}\omega_{780}/c$. Avec cette définition, nous pouvons écrire la variation d'énergie cinétique $d\mathrm{E}$ pendant un temps dt due aux phénomènes d'émission spontanée comme le produit du nombre de photons diffusés par photons multiplié par l'incrément en énergie cinétique lié à chaque diffusion, *i.e.*,

$$\frac{d\mathrm{E}}{dt} = \frac{p_{eff}^2}{2m}\Gamma_d. \tag{5.54}$$

Cela nous permet d'introduire un nouveau temps caractéristique : le temps de "sortie" du piège τ_s. C'est le temps au bout duquel la variation d'énergie (5.54) est égale à l'énergie nécessaire pour que l'atome ne soit plus piégé, soit E_0. En effet, lorsque l'atome a accumulé une énergie supérieure à l'énergie de liaison E_0, alors il est dans la partie où le potentiel est supérieur à 0 et il n'est donc plus piégé. Le temps de sortie est ainsi défini par

$$\tau_s = \mathrm{E}_0 \left(\frac{d\mathrm{E}}{dt}\right)^{-1} = \frac{2m\mathrm{E}_0}{p_{eff}^2}\Gamma_d^{-1}. \tag{5.55}$$

Dans l'exemple de piégeage que nous donnions en début de ce chapitre (cf. Fig.5.5), la proportion de l'atome dans l'état excité à la position du piège vaut $\rho_{ee}(z_t) \simeq 4.0\%$, ce qui donne un temps de diffusion $\tau_d = 0.7$ µs et un temps de sortie $\tau_s = 5.1$ ms.

5.4.7 Effet tunnel

L'atome est piégé dans le puits de potentiel formé par l'habillage des lasers qui permet la création d'une barrière de potentiel. Celle-ci possède une épaisseur finie, comme nous le constatons en traçant le potentiel total (cf. Fig.5.5(c)). Il est bien connu qu'à ces échelles microscopiques, où la mécanique quantique décrit l'évolution et le comportement des divers constituants, la probabilité pour l'atome de traverser la barrière n'est pas nulle, c'est l'effet tunnel [Razavy, 2003]. Ce phénomène introduit alors une échelle de temps au bout de laquelle l'atome quitte le piège et se retrouve perdu. C'est ce temps caractéristique que nous allons déterminer à présent.

Approximation Wentzel-Kramers-Brillouin

Pour ce calcul nous utilisons la méthode Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) qui consiste à développer asymptotiquement la fonction d'onde au premier ordre de $\hbar$ [Griffiths, 2005]. C'est une approche semi-classique : dans la limite où $\hbar \to 0$ nous sommes supposés retrouver le cas classique (de manière analogue à l'optique ondulatoire où nous retrouvons les lois de l'optique géométrique lorsque $\lambda \to 0$). En Annexe C, nous présentons cette approximation et

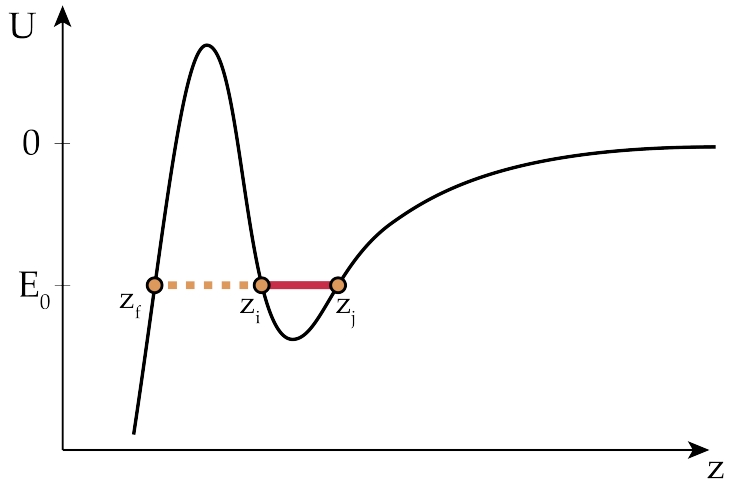


FIGURE 5.9 – **Profil du potentiel de piégeage pour le calcul de l'effet tunnel dans l'approximation WKB.** L'atome est initialement dans l'état fondamental du piège, formé par le potentiel total (trait plein noir), caractérisé par l'énergie E_0 (trait plein rouge). La probabilité pour que l'atome passe de z_i à z_f (trait pointillé orange) est non-nulle en mécanique quantique : c'est l'effet tunnel.

nous déterminons les fonctions d'ondes dans les différentes régions du potentiel, dont nous traçons un schéma en Fig.5.9.

Les calculs, détaillés dans la section C.1.1, nous ont permis d'exprimer la fonction d'onde dans la région classique ($z_i < z < z_j$) sous la forme

$$\Psi(z) = \frac{1}{\sqrt{p_0(z)}}\left[A e^{\frac{i}{\hbar}\int_z^{z_i} p_0(z')dz'} + B e^{-\frac{i}{\hbar}\int_z^{z_i} p_0(z')dz'}\right], \tag{5.56}$$

où A et B sont les amplitudes incidente et réfléchie de l'onde. Dans la région non-classique, les fonctions d'ondes sont exponentiellement croissantes ou décroissantes (voir section C.1.2). Nous remarquons que la probabilité de présence de la particule va être inversement proportionnelle à son impulsion, ou bien encore sa vitesse. D'un point de vue physique, il y a en effet moins de chance de trouver la particule à un endroit de l'espace où cette dernière se déplace rapidement.

Calcul de la probabilité

Proche des points z_i et z_f, nous constatons dans l'expression du dénominateur de la fonction d'onde (5.56) que cette solution approchée devient singulière. L'approximation WKB n'est pas valide à ces points où l'on passe du régime classique au régime quantique. Ainsi dans la section C.2 en Annexe C, nous avons déterminé les relations de connexion entre les différents coefficients d'amplitude en linéarisant le potentiel autour des points z_i et z_f. Finalement, avec ces formules de connexion obtenues en (C.25a) et (C.36), nous pouvons écrire l'amplitude de l'onde incidente sous la forme :

$$A = \left[\frac{C}{2} - iD\right] e^{i\frac{\pi}{4}} = \left[\frac{e^{-\gamma}}{2} + \frac{e^{\gamma}}{2}\right] E = \cosh(\gamma) E, \tag{5.57}$$

où E est l'amplitude de l'onde transmise. La probabilité par effet tunnel est définie comme le module au carré du rapport des amplitudes transmise E et incidente A, soit

$$\begin{aligned} \mathrm{P}_t &= \left|\frac{\mathrm{E}}{\mathrm{A}}\right|^2 \\ &= \frac{1}{\cosh^2(\gamma)} \\ &= \frac{4}{\mathrm{e}^{2\gamma}\left[1-\mathrm{e}^{-2\gamma}\right]^2}, \end{aligned} \tag{5.58}$$

Dans le cas où l'énergie de l'atome incident (ici E_0) est faible comparée à la hauteur du potentiel (e.g., pour une haute et large barrière), nous avons $\mathrm{e}^{-2\gamma} \to 0$, la probabilité se réduit alors à

$$\mathrm{P}_t \simeq 4\mathrm{e}^{-2\gamma}. \tag{5.59}$$

En remplaçant γ puis l'impulsion p_0 par leurs expressions respectives (C.29) et (C.3), nous obtenons finalement

$$\mathrm{P}_t \simeq 4\mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\int_{z_i}^{z_f}\sqrt{2m[\mathrm{U}(z')-\mathrm{E}_0]}dz'}. \tag{5.60}$$

Temps caractéristique

Nous venons de déterminer l'expression de la probabilité pour que l'atome s'échappe du piège par effet tunnel. Le temps caractéristique est inversement proportionnel à cette probabilité, il est donné par

$$\tau_t = (\mathrm{P}_t\omega_z/2\pi)^{-1}, \tag{5.61}$$

où nous définissons ω_z comme la fréquence du piège dans la direction (Oz). En effet, l'atome oscille dans le piège et passe à la position z_i à cette fréquence. Cette dernière dépend des déviations standards de la position et de l'impulsion de l'atome dans l'état fondamental du piège donnés respectivement par (5.48a) et (5.48b) :

$$\omega_z = 2\pi\frac{\Delta p}{m\Delta z}, \tag{5.62}$$

où m est la masse de l'atome. Nous rappelons par ailleurs que $\omega_z = 2\pi\tau_{ad}^{-1}$, où τ_{ad} a été défini en (5.50).

Finalement le temps caractéristique au bout duquel l'atome quitte le piège en passant de z_i à z_f par effet tunnel vaut

$$\tau_t = \frac{m\Delta z}{\mathrm{P}_t\Delta p}. \tag{5.63}$$

Si nous reprenons le potentiel obtenu dans la configuration utilisée en Fig.5.5, nous obtenons une probabilité $\mathrm{P}_t = 2.6\times10^{-6}$ ainsi qu'une fréquence $\omega_z = 2\pi\cdot 49.7$ MHz, ce qui donne un temps caractéristique $\tau_t \simeq 7.8$ ms.

5.4.8 Effet anti-amortissement

Le potentiel total (5.33) a été déterminé en considérant l'atome avec une faible vitesse. Plus exactement, nous avions considéré que la cohérence atomique interne ρ_{ge} s'adaptait rapidement par rapport à la vitesse v de l'atome. En considérant les corrections non-adiabatiques, les solutions s'écrivent au premier ordre [Cohen-Tannoudji, 1983] :

$$\frac{d\rho_{ee}}{dt} = \frac{\partial\rho_{ee}^{(1)}}{\partial t} + v\frac{\partial\rho_{ee}^{(0)}}{\partial z}, \tag{5.64}$$

$$\frac{d\rho_{ge}}{dt} = \frac{\partial\rho_{ge}^{(1)}}{\partial t} + v\frac{\partial\rho_{ge}^{(0)}}{\partial z}, \tag{5.65}$$

où $\rho_{ge}^{(0)}$ est la solution stationnaire donnée par (5.19b). A faible intensité ($\rho_{ee}+\rho_{gg}\sim\rho_{gg}=1$) elle est donnée par $\rho_{ge}^{(0)}\approx\Omega_R/(2\delta_c^*)$. Les dérivées temporelles sont nulles car les termes $\rho_{ee}^{(1)}$ et $\rho_{ge}^{(1)}$ ne dépendent pas explicitement du temps. Ainsi, dans le régime des faibles intensités (au premier ordre de Ω_R), l'équation (5.17b) donne

$$\rho_{ge}^{(1)}=-\frac{1}{i\delta_c^*}\frac{\partial\rho_{ge}^{(0)}}{\partial z}v=\frac{i\delta_c\Omega_R}{2|\delta_c|^6}\left(-\frac{d\delta}{dz}+i\frac{d\Gamma}{dz}\right)\left(\delta^2+i\delta\Gamma-\frac{\Gamma^2}{4}\right)v, \tag{5.66}$$

où $\delta_c(z)=\delta(z)+i\Gamma(z)/2$ est le désaccord complexe. Dans cette démonstration nous prenons le cas où la largeur de l'état excité Γ dépend de la position z.

D'après (5.17a), la population dans l'état excité au premier ordre s'écrit

$$\rho_{ee}^{(1)}=\Gamma^{-1}\left(\Omega_R\mathrm{Im}\rho_{ge}^{(1)}-v\frac{\partial\rho_{ee}^{(0)}}{\partial z}\right). \tag{5.67}$$

On peut montrer que la partie imaginaire de (5.66) est donnée par

$$\mathrm{Im}\rho_{ge}^{(1)}=\frac{\Omega_R}{8|\delta_c|^6}\left[\delta\left(3\Gamma^2-4\delta^2\right)\frac{d\delta}{dz}+\Gamma\left(\frac{\Gamma^2}{4}-3\delta^2\right)\frac{d\Gamma}{dz}\right]v \tag{5.68}$$

En outre, la dérivée de la population dans l'état excité à l'ordre 0 correspond à la dérivée de la solution stationnaire déterminée en (5.19a), soit

$$\frac{\partial\rho_{ee}^{(0)}}{\partial z}\simeq\frac{\partial}{\partial z}\left[\frac{\Omega_R^2}{4|\delta_c|^2}\right]=-\frac{\Omega_R^2}{2|\delta_c|^4}\left(\delta\frac{d\delta}{dz}+\frac{\Gamma}{4}\frac{d\Gamma}{dz}\right), \tag{5.69}$$

où nous considérons toujours de faibles intensités (soit $\Omega_R<<\delta_c$).

Finalement en utilisant les résultats (5.68) et (5.69), nous pouvons réécrire (5.67) sous la forme :

$$\rho_{ee}^{(1)}=\frac{\rho_{ee}^{(0)}}{4|\delta_c|^4}\left[8\delta\Gamma\frac{d\delta}{dz}+\left(\Gamma^2-4\delta^2\right)\frac{d\Gamma}{dz}\right]v, \tag{5.70}$$

où nous avons utilisé l'expression de $\rho_{ee}^{(0)}$ à basse intensité (cf. relation (5.69)).

Cette correction entraîne un terme supplémentaire à la force de piégeage (5.31) donné par

$$F^{(1)}(z)=-\rho_{ee}^{(1)}(z)\frac{dU_{5P}}{dz}=-\frac{\rho_{ee}^{(0)}(z)}{4|\delta_c(z)|^4}\frac{dU_{5P}}{dz}\left[8\delta(z)\Gamma(z)\frac{d\delta}{dz}+\left(\Gamma(z)^2-4\delta(z)^2\right)\frac{d\Gamma}{dz}\right]v. \tag{5.71}$$

En exprimant la force sous la forme $F^{(1)}=\beta mv$, nous identifions le coefficient d'anti-amortissement β :

$$\beta(z)=-\frac{\omega_r\rho_{ee}^{(0)}(z)}{2\hbar k_0^2|\delta_c(z)|^4}\frac{dU_{5P}}{dz}\left[8\delta(z)\Gamma(z)\frac{d\delta}{dz}+\left(\Gamma(z)^2-4\delta(z)^2\right)\frac{d\Gamma}{dz}\right], \tag{5.72}$$

avec l'énergie de recul donnée par $\hbar\omega_r=\hbar^2k_0^2/(2m)$. Le laser à 780 est désaccordé sur le bleu ainsi $\beta>0$, résultant en un phénomène d'anti-amortissement [Chang et al., 2014].

Dans notre configuration nous avons montré que $\Gamma(z)\equiv\Gamma_0$ (cf. section 5.4.5), ainsi le coefficient (5.72) devient

$$\beta(z)=-\frac{4\omega_r\Gamma_0\rho_{ee}^{(0)}(z)\delta(z)}{\hbar k_0^2|\delta_c(z)|^4}\frac{dU_{5P}}{dz}\frac{d\delta}{dz}. \tag{5.73}$$

Ce coefficient nous permet de définir une nouvelle échelle de temps dans le piège. En effet, la relation (5.71) nous permet d'écrire,

$$\dot{p}=\beta(z_t)p, \tag{5.74}$$

dont la solution est de la forme

$$\Delta p(t) = \Delta p e^{\beta(z_t)t}. \tag{5.75}$$

Nous prenons ici la valeur du coefficient d'anti-amortissement (5.73) à la position du piège z_t. Nous définissons le temps caractéristique d'anti-amortissement τ_a tel que la variation d'énergie pendant ce temps égale à l'énergie de liaison E_0 :

$$\begin{aligned} & E(t=\tau_a) - E(t=0) = |E_0| \\ \Leftrightarrow \quad & \frac{\Delta p}{2m}\left[e^{2\beta(z_t)\tau_a} - 1\right] = |E_0|, \end{aligned} \tag{5.76}$$

nous permettant d'écrire finalement

$$\tau_a = \frac{1}{2\beta(z_t)} \ln\left[1 + \frac{2m|E_0|}{\Delta p^2}\right], \tag{5.77}$$

où Δp est donné par (5.48b).

Avec les paramètres de piège obtenus dans la configuration étudiée en début de chapitre (cf. Fig.5.5), nous obtenons un temps $\tau_a \simeq 89.4$ ms.

5.4.9 Chauffage transitoire

Suite à une émission spontanée, l'atome est temporairement non-piégé. La fonction d'onde fondamentale évolue alors, dans l'état 5S, pendant un temps noté t_{trans} avant que la dynamique interne ne se rééquilibre, et que l'atome soit de nouveau piégé dans l'état habillé. Pour connaître l'évolution de la fonction d'onde pendant ce temps t_{trans}, nous utilisons les propagateurs [Sakurai, 1994]. La formulation des propagateurs est présentée en Annexe D, ainsi que le calcul du propagateur d'une particule libre. Dans notre cas nous cherchons à calculer le propagateur qui décrit l'évolution libre de la particule lorsque qu'elle n'est plus piégée pendant un temps t_{trans}.

Évolution libre de l'atome

Nous cherchons à connaître le propagateur de l'atome lorsque celui-ci se retrouve dans l'état fondamental U_{5S} et qu'il n'est plus piégé. Pour simplifier, nous linéarisons le hamiltonien autour de la position du piège z_t :

$$\hat{\mathscr{H}} \simeq \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + U_{5S}(z_t) + U'_{5S}(z_t)(\hat{z} - z_t). \tag{5.78}$$

Cette linéarisation se justifie par le fait que l'atome soit très confiné et que le temps de transition pendant lequel il évolue librement dans l'état fondamental est assez court, de sorte à ce que la fonction d'onde ne soit que très faiblement modifiée. Par ailleurs les termes $U_{5S}(z_t)$ et $U'_{5S}(z_t)z_t$ dans (5.78) peuvent être négligés car ils ne sont que des décalages en énergie constants. Finalement nous avons le hamiltonien suivant :

$$\hat{\mathscr{H}} \simeq \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + U'_{5S}(z_t)\hat{z}. \tag{5.79}$$

Pour calculer le propagateur de la particule nous calculons le Lagrangien classique du système correspondant (voir Annexe D, section D.3). Ainsi, en insérant (D.41) dans l'expression du propagateur (D.37), nous pouvons exprimer le propagateur sous la forme suivante :

$$U(z_f, t_f; z_i, t_i) = U_o(z_f, t_f; z_i, t_i) e^{-iU'_{5S}(z_f+z_i)(t_f-t_i)/(2\hbar) - iU'^2_{5S}(t_f-t_i)^3/(24\hbar m)}, \tag{5.80}$$

où $U_o(z_f, t_f; z_i, t_i)$ correspond au propagateur d'une particule libre, défini par (D.23). Nous avons donc calculé le propagateur (5.80) associé à l'hamiltonien (5.79), qui décrit l'évolution d'un atome entre une position z_i et une position z_f en un temps $t_f - t_i$, lorsque l'atome se retrouve non piégé dans l'état fondamental 5S.

Temps de chauffage transitoire

L'atome est initialement piégé dans une superposition des états 5S et 5P. Lorsqu'une émission spontanée a lieu, l'atome se retrouve uniquement dans l'état 5S, l'atome n'est plus piégé. Ce dernier se dirige alors vers la surface et accumule de l'énergie cinétique pendant un temps transitoire $t_{trans} = |\delta_c(z_t)|^{-1}$, où δ_c est le désaccord complexe défini en (5.66). Au bout de ce temps, la cohérence atomique est restaurée et l'atome est à nouveau dans une superposition des états fondamental et excité. Nous cherchons à connaître l'évolution de sa fonction d'onde pendant ce temps pour calculer les effets de chauffage et de perte.

Nous considérons que l'émission spontanée a lieu à l'instant $t_i = 0$ et que l'atome est initialement dans l'état fondamental du piège $\Phi(z_i)$, avec z_i sa position initiale. Une fois la cohérence atomique de nouveau à l'équilibre, l'atome est dans le potentiel de piégeage dans un état

$$\Phi(z_f) \sim \int dz_i \mathrm{U}(z_f, t_{trans}; z_i, 0)\Phi(z_i). \tag{5.81}$$

Lorsque nous avons calculé la fonction d'onde de l'état fondamental nous avons discrétisé spatialement le problème. Il faut en faire de même pour le propagateur $\mathrm{U}(z_f, t_{trans}; z_i, 0)$ défini par (5.80). Dans cette expression le terme en exponentielle se comporte correctement à temps courts, ce qui n'est pas le cas du terme exponentiel dans le propagateur $\mathrm{U}_o(z_f, t_f; z_i, t_i)$. Afin de remédier à cela, nous remplaçons ce terme par le propagateur $\mathrm{K}_{mn}(t)$ de l'équation de Schrödinger discrétisée [LeVeque, 2007] :

$$\frac{\partial \Phi_n}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m\Delta}\left[\Phi_{n+1}(t) - 2\Phi_n(t) + \Phi_{n-1}(t)\right], \tag{5.82}$$

où Δ est le pas du réseau utilisé dans la discrétisation spatiale du problème et n l'indice du site. Le propagateur, qui vérifie $\Phi_m(t) = \mathrm{K}_{mn}(t)\Phi_n(0)$, est donné par [Chang et al., 2014]

$$\mathrm{K}_{mn}(t) = i^{m-n}\mathrm{J}_{m-n}\left(\frac{\hbar}{2m\Delta}t\right)\mathrm{e}^{-2i\hbar t/(2m\Delta)}, \tag{5.83}$$

où J_n est la fonction de Bessel d'ordre n.

D'après nos simulations précédentes, le désaccord complexe à la position du piège $z_t = 28$ nm vaut $|\delta_c(z_t)| \sim 2\pi \cdot 0.3$ GHz, ce qui donne un temps transitoire $t_{trans} \simeq 50.3$ ns.

La probabilité pour que l'atome soit perdu par émission spontanée après son évolution libre dans l'état 5S est donnée par le recouvrement des états initial et final :

$$\mathrm{P}_c = 1 - \left|\Phi(z_f)^*\Phi(z_i)\right|^2. \tag{5.84}$$

Le temps de chauffage transitoire correspond alors à

$$\tau_c = (\mathrm{P}_c\Gamma_d)^{-1}. \tag{5.85}$$

Toujours dans la première configuration de piège présentée en début de chapitre (cf. Fig.5.5), nous trouvons une probabilité $\mathrm{P}_c \simeq 8 \times 10^{-4}$, soit encore le temps correspondant suivant : $\tau_c \simeq 0.8$ ms.

5.4.10 Temps de vie du piège

Définition

En admettant que l'ensemble des phénomènes physiques ayant mené aux expressions des temps précédemment définis sont indépendants, nous obtenons le temps de vie du piège par l'expression :

$$\tau = \frac{1}{\tau_s^{-1} + \tau_t^{-1} + \tau_a^{-1} + \tau_c^{-1}}, \tag{5.86}$$

où nous rappelons que τ_s est le temps de sortie défini par (5.55), τ_t est le temps d'effet tunnel défini par (5.63), τ_a est le temps d'anti-amortissement défini par (5.77) et τ_c est le temps de chauffage transitoire défini par (5.85).

En reprenant le piège calculé dans la configuration de la Fig.5.5 et les résultats des différents temps introduits précédemment, nous trouvons un temps de vie total $\tau \simeq 0.6$ ms. Le temps le plus limitant est celui induit par l'effet de chauffage transitoire (~ 0.8 ms).

Influence des paramètres optiques

Nous avons vu en section 5.4.2 que les paramètres optiques pouvaient être changés afin de varier la géométrie du piège. Le piège est alors modifié et c'est également le cas des différents temps caractéristiques. Pour étudier l'influence des paramètres lasers sur le temps de vie des atomes dans le piège, nous calculons le potentiel de piégeage puis les temps caractéristiques correspondants pour chaque valeur de puissance du faisceau laser à 1529 nm. Nous reportons en Fig.5.10 l'évolution de la hauteur de la barrière de potentiel U_b et de la profondeur du piège U_0 pour deux positions de piégeage : $z_t = 25$ et 50 nm correspondants aux courbes tiretée et pleine, respectivement. Nous constatons que la barrière de potentiel est d'autant plus importante que le piège est éloigné de la surface. La profondeur du piège, principalement contrôlée par le potentiel de l'état fondamental (5S), augmente avec la puissance du laser ainsi qu'en réduisant la distance atome-surface.

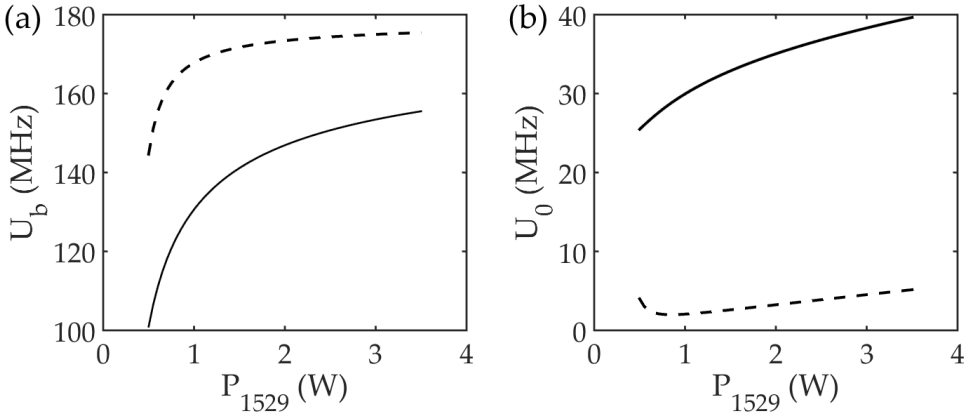


FIGURE 5.10 – **Évolution de la hauteur de barrière et de la profondeur du piège en fonction de la puissance du laser à 1529 nm.** Changer la puissance du laser à 1529 nm permet de modifier la géométrie du piège telles que (a) la hauteur de la barrière de potentiel U_b et (b) la profondeur de piège U_0. Les lignes pleine et tiretée correspondent aux positions de piège $z_t = 25$ nm et $z_t = 50$ nm, respectivement (cf. Fig.5.6).

En Fig.5.11 nous présentons l'évolution des temps caractéristiques τ_{ad}, τ_d, τ_s, τ_t, τ_a et τ_c pour deux positions de pièges. Tous les temps contribuant au temps de vie du piège (5.86) augmentent avec la puissance du laser à 1529 nm. Cette dernière est donc un paramètre clé de la méthode de piégeage car elle permet d'influer sur le gradient énergétique de l'état excité (5P) et par conséquent d'optimiser les caractéristiques du piège. Expérimentalement la puissance optimale (*i.e.*, maximale) du laser sera fixée par la capacité thermique et l'absorption à 1529 nm des matériaux composant la nanostructure. Dans le rang de paramètres étudié ici, et pour des distances de piégeage autour de $z_t = 50$ nm, ce sont les temps de sortie τ_s et d'anti-amortissement τ_a qui limitent le temps de piégeage. En effet, en traçant les contributions de ces deux temps au temps de vie τ en Fig.5.11(f), nous constatons que ces deux temps sont en compétition : à très faible puissance le temps d'anti-amortissement domine et lorsque P_{1529} augmente, le chauffage par diffusion de photon devient le phénomène limitant. Pour la position $z_t = 25$ nm, le chauffage par anti-amortissement devient l'effet le plus limitant et détermine complètement le temps de vie sur toute la plage de puissance

considérée ici.

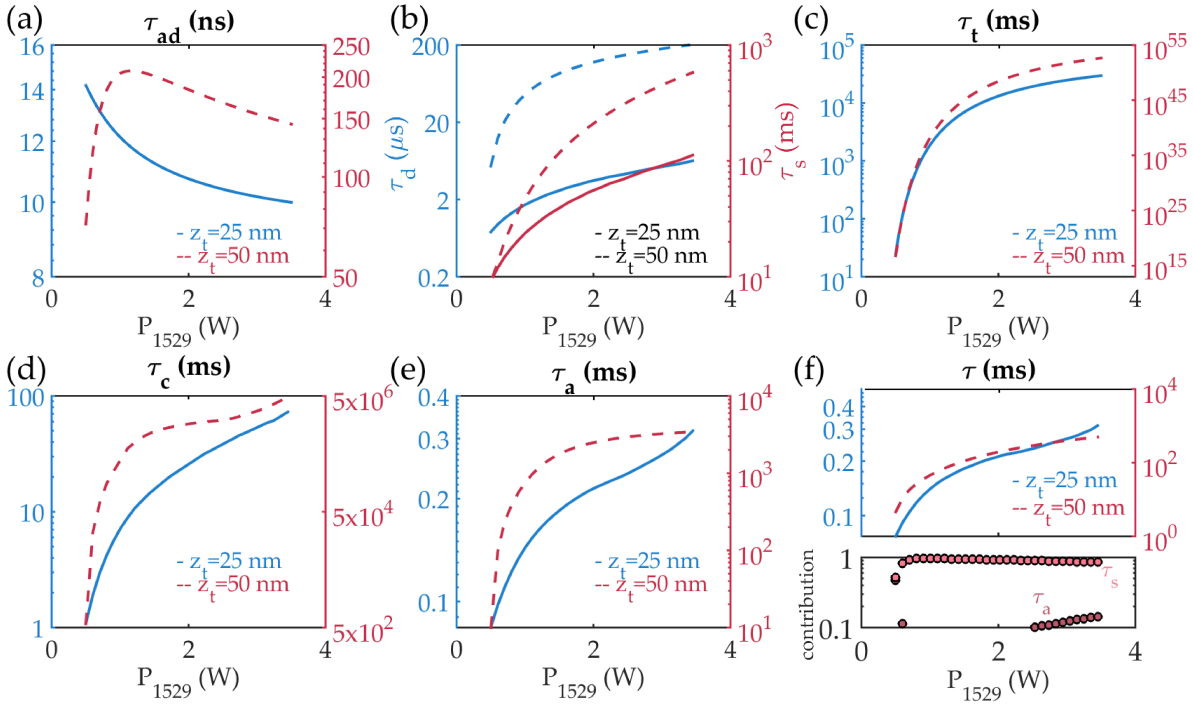


FIGURE 5.11 – **Évolution des temps caractéristiques du piège.** Varier la puissance du laser 1529 permet de modifier les temps caractéristiques du piège tels que (a) le temps adiabatique τ_{ad}, (b) les temps de diffusion τ_d et de sortie τ_s, (c) le temps tunnel τ_t, (d) le temps de chauffage transitoire τ_c, (e) le temps d'anti-amortissement τ_a et (f) le temps de vie du piège total $\tau = \left(\tau_s^{-1} + \tau_t^{-1} + \tau_c^{-1} + \tau_a^{-1}\right)^{-1}$. Nous reportons également les contributions des temps τ_a et τ_s au temps de vie τ pour la position $z_t = 50$ nm (la contribution du temps tunnel est nulle). Les traits plein et pointillé correspondent aux positions $z_t = 25$ nm et $z_t = 50$ nm, respectivement. (a),(c)-(f) : les couleurs bleue et rouge sont également associées à ces deux positions respectives. (b) Les couleurs bleue et rouge correspondent aux temps de diffusion et de sortie, respectivement.

Dans l'approximation WKB, le temps tunnel τ_t est exponentiellement proportionnel à la hauteur et la largeur de la barrière (cf. relation (5.63)). Pour des hauteurs de barrière similaires, la réduction de la largeur à des distances proches de la nanostructure engendre une réduction considérable sur le temps τ_t (une cinquantaine d'ordres de grandeurs), comme nous pouvons l'observer sur la Fig.5.11(c). Pour de très faibles distances, l'effet tunnel devient donc l'effet limitant au temps de vie.

Nous avons caractérisé le piège formé dans plan 2D parallèle à la surface plane et stratifiée. Nous allons à présent introduire une modulation périodique du potentiel de piégeage en réalisant les simulations numériques avec la surface stratifiée et structurée optimisée au Chapitre 3.

5.5 Caractérisation du réseau 1D

Pour rappel, la géométrie de la surface est donnée en Fig.3.13 du Chapitre 3. La force de piégeage se calcule de la même manière que dans le cas de la surface plane mais en prenant en compte cette-fois si la dépendance longitudinale (selon x) du potentiel CP et optique. Les potentiels dus aux fluctuations quantiques du vide ont été déterminés au Chapitre 4 tandis que les intensités optiques ont été calculées au Chapitre 3.

Nous rappelons que dans cette configuration, nous utilisons deux lasers à 1529 nm en faces avant et arrière de la surface, notées F et B, respectivement. En effet, comme nous

l'avons expliqué précédemment, cela permet de s'assurer du piégeage efficace des atomes au-dessus des arrêtes et des fentes du réseau (cf. Fig.3.15). Les puissances des deux lasers sont reliées par un coefficient de proportionnalité tel que

$$P_{1529}^{(F)} = \alpha_{1529} P_{1529}^{(B)}. \tag{5.87}$$

5.5.1 Création du réseau 1D

Dans un premier temps les lasers utilisés pour exciter la résonance plasmonique sont fixés à $P_{1529}^{(B)} = 400$ mW et $P_{1529}^{(F)} = 2.8$ W (soit $\alpha_{1529} = 7$) avec un *waist* de 200 µm. Le laser qui couple les deux états est fixé à une longueur d'onde $\lambda_{780} = 780.2148$ nm (soit $\delta_0 = 2\pi \cdot 12.9$ GHz) et une puissance $P_{780} = 10$ µW sur un *waist* de 200 µm. Cela correspond à une pulsation de Rabi $\Omega_R = 2\pi \cdot 132.4$ MHz, que nous prenons constante sur tout l'espace. Nous reportons en Fig.5.12(a) le profil bidimensionnel du potentiel de piégeage. Les atomes sont piégés dans les puits de potentiel formés à une position z_t =35 nm des arêtes et espacés d'une période ℓ = 100 nm. Nous présentons en Fig.5.12(b) les coupes unidimensionnelles selon (Oz) au-dessus d'une arête et d'une fente correspondant aux traits plein et pointillé, respectivement. Le profil spatial de l'état excité 5P est décroissant pour chaque position x de manière à créer une barrière de potentiel et piéger les atomes dans un réseau modulé par les forces de Casimir-Polder. Nous reportons en Fig.5.12(c) le profil de ce réseau et nous notons U_ℓ la modulation résultante, *i.e.*, la profondeur du réseau. Dans cette configuration elle est définie par les minima des puits de potentiel créés au-dessus d'une fente et d'une arête et vaut $U_\ell \simeq 4$ MHz, soit encore $U_\ell = 69\ E_r$, où $E_r = \hbar^2 k^2/2m$ est l'énergie de recul (introduite en section 1.2.2 du Chapitre 1), avec $k = \pi/\ell$ le vecteur d'onde du réseau.

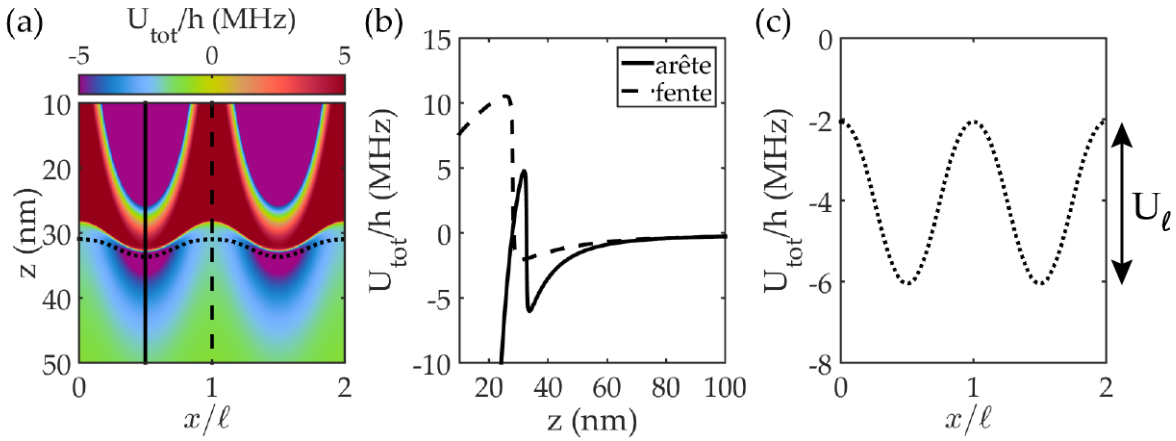


FIGURE 5.12 – **Potentiel de piégeage structuré à une dimension.** (a) Profil à deux dimensions du potentiel de piégeage. Les atomes sont piégés devant chaque arête du réseau à une distance z_t =35 nm de la nanostructure. Les lignes continue et tiretée correspondent (b) aux coupes transversales (selon z) au-dessus d'une arête et d'une fente, respectivement, tandis que la ligne pointillée correspond (c) à une coupe longitudinale (selon x). La modulation par les forces du vide créée un réseau de période égale à celle de la nanostructure, soit ℓ = 100 nm, et de profondeur U_ℓ = 4 MHz. Paramètres des lasers : $I_{1529}^{(B)} = 400$ mW/m^2, $\alpha_{1529} = 7$, $\Omega_R = 2\pi \cdot 132.4$ MHz et $\delta_0 = 2\pi \cdot 12.9$ GHz.

5.5.2 Temps de vie

Nous calculons également les temps caractéristiques pour cette configuration. Ils sont définis de manière identique à ceux introduits précédemment pour le cas d'une surface plane. Nous ajoutons cependant un deuxième temps pour l'effet tunnel, correspondant à la possibilité de l'atome de passer d'un site à l'autre. Ainsi nous avons maintenant deux temps caractéristiques pour l'effet tunnel : $\tau_{t,z}$ et $\tau_{t,x}$. Le premier est calculé de manière strictement identique à celui défini par (5.63) en intégrant sur la trajectoire à travers la barrière de

potentiel. Le temps caractéristique pour la direction x est estimé de manière similaire. Tout d'abord nous approchons le puits de potentiel par un oscillateur harmonique de la forme

$$U_{oh}(x) \simeq U_{min} + \frac{1}{2}U''_{oh}(x - x_0)^2, \tag{5.88}$$

avec U_{min} et x_0 les décalages de l'énergie et de la position. Nous avons également dans le terme quadratique l'amplitude U''_{oh}, définie telle que

$$U''_{oh} = m\omega_x^2, \tag{5.89}$$

où m est la masse de l'atome et ω_x la fréquence du piège. En Fig.5.13 nous présentons un ajustement du potentiel, déterminé dans la configuration précédente, par l'expression (5.88). Cela nous permet de déduire l'énergie fondamentale

$$E_{0,x} = \hbar\omega_x/2, \tag{5.90}$$

où la fréquence du piège est définie d'après (5.89) par

$$\omega_x = \sqrt{\frac{U''_{oh}}{m}}. \tag{5.91}$$

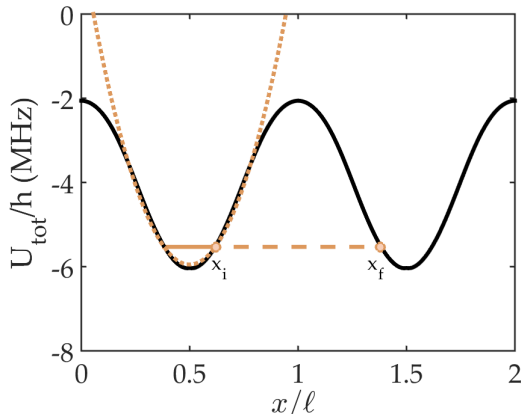


FIGURE 5.13 – **Approximation d'un puits de potentiel par un oscillateur harmonique pour le calcul par effet tunnel dans la direction (Ox).** Le potentiel de piégeage (trait plein noir) est modulé avec une période $\ell = 100$ nm. Le puits est approché par un oscillateur harmonique de la forme (5.88) (trait pointillé orange). Cet ajustement donne une énergie fondamentale $E_{0,x}/h \simeq -5.5$ MHz (trait plein orange). L'atome peut alors passer d'un site à l'autre par effet tunnel en suivant la trajectoire délimitée par x_i et x_f (tirets oranges).

Ainsi nous trouvons $\omega_x \simeq 2\pi\cdot 840$ kHz et $E_{0,x}/h \simeq -5.5$ MHz. Cette valeur diffère de l'énergie fondamentale calculée selon la direction z, où nous avions $E_{0,z}/h \simeq -2.6$ MHz. La probabilité est toujours donnée dans l'approximation WKB, mais nous intégrons cette fois-ci de x_i à x_f définis tels que $U(x_i) = U(x_f) = E_{0,x}$ (cf. Fig.5.13). Nous précisons que le profil modulé est obtenu en prenant le minimum du potentiel selon (Oz) pour chaque position x (courbe pointillée dans Fig.5.12(a)).

Ce nouveau calcul nous permet de caractériser le piège dans la direction x. Nous avons finalement un piège de profondeurs $\{U_\ell, U_0\} = h\cdot\{4,6\}$ MHz positionné à $z_t = 35$ nm, avec les fréquences de piège $\{\omega_x, \omega_z\} \simeq 2\pi\cdot\{0.8, 3.1\}$ MHz. Par ailleurs, le calcul des différents temps introduits en section 5.4 permet d'obtenir : un temps adiabatique $\tau_{ad} = 20$ µs tandis que le temps total $\tau = 363$ ns est complètement limité par le temps tunnel $\tau_{t,z} = 370$ ns. Augmenter l'épaisseur et/ou la hauteur de la barrière est primordial pour augmenter ce temps. Cependant l'effet anti-amortissement décrit en section 5.4.8 pourra également s'avérer limitant, avec ici $\tau_a \simeq 20$ µs. Le temps de sortie est quant à lui largement supérieur : $\tau_s = 2.7$ ms, tandis que l'on trouve un temps de chauffage transitoire $\tau_c = 0.6$ ms.

5.5.3 Contrôle de la géométrie

De la même manière que dans la section 5.4.2, nous allons caractériser le piège à une dimension en fonction des paramètres des lasers. Nous balayons en Fig.5.14(a),(b) le paramètre α_{1529} afin de trouver les profils d'intensités optimaux qui créent une barrière de potentiel devant une fente et une arête. Nous reportons l'évolution des profondeurs des pièges créées devant une arête U_ℓ^{arete} et une fente U_ℓ^{fente}. En effet, le réseau à une dimension est créé lorsqu'une barrière de potentiel est formée pour chaque position x, les atomes étant finalement piégés devant chaque arête diélectrique. La profondeur du réseau U_ℓ est définie de manière différente selon si le maximum de la barrière devant l'arête est inférieur au minimum du piège devant une fente ou non. Nous reportons en Fig.5.14(c) la variation de la profondeur totale en fonction des paramètres lasers. Nous observons que pour $\alpha_{1529} > 7$ la profondeur du réseau est peu sensible à une augmentation de la puissance du laser 1529 nm en face avant (F). Pour minimiser les effets de chaleur due à l'intensité optique, nous prenons $\alpha_{1529} = 7$, ce qui fixe le profil spatial de l'intensité tout en gardant son amplitude comme paramètre sur lequel agir *via* le laser 1529 en face arrière ($P_{1529}^{(B)}$).

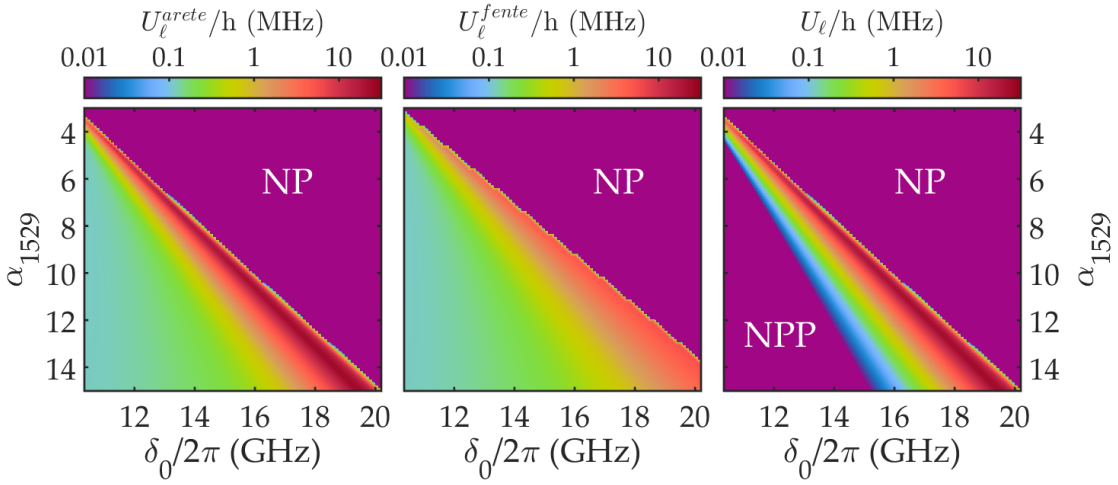


FIGURE 5.14 – **Influence des paramètres lasers sur la géométrie du réseau 1D.** Évolution de la profondeur du piège au-dessus (a) d'une arête et (b) d'une fente et (c) de la profondeur du réseau à 1 dimension U_ℓ en fonction du paramètre α_{1529} (cf. texte) et du désaccord δ_0 du laser à 780 nm par rapport à la transition dans le vide. NP = Non Piégé. NPP = Non Piégé Périodiquement.

Comme nous l'avons vu précédemment, la puissance du laser 1529 (B) est un paramètre clé de la méthode pour augmenter le temps de vie du piège. En Fig.5.15(a) nous présentons la dépendance de la profondeur du réseau U_ℓ en fonction de la puissance $P_{1529}^{(B)}$. Le laser à 780 nm peut aussi être utilisé pour varier les paramètres de piégeage en contrôlant le couplage entre les états fondamental (5S) et excité (5P). Changer la fréquence et la puissance de ce laser permet par exemple d'augmenter la profondeur du réseau de 0 à 22 MHz (~ 380 E_r). Bien que la contribution à la profondeur U_ℓ de ces paramètres semble équivalente, leur influence sur la distance atome-surface est très différente. En effet, comme nous le constatons en Fig.5.15 (c), une variation de P_{780} à désaccord δ_0 constant entraîne peu de modification sur la position du piège z_t (ligne pointillée) tandis qu'un scan de δ_0 à puissance P_{780} constante modifie la position de 18 à 88 nm (ligne tiretée).

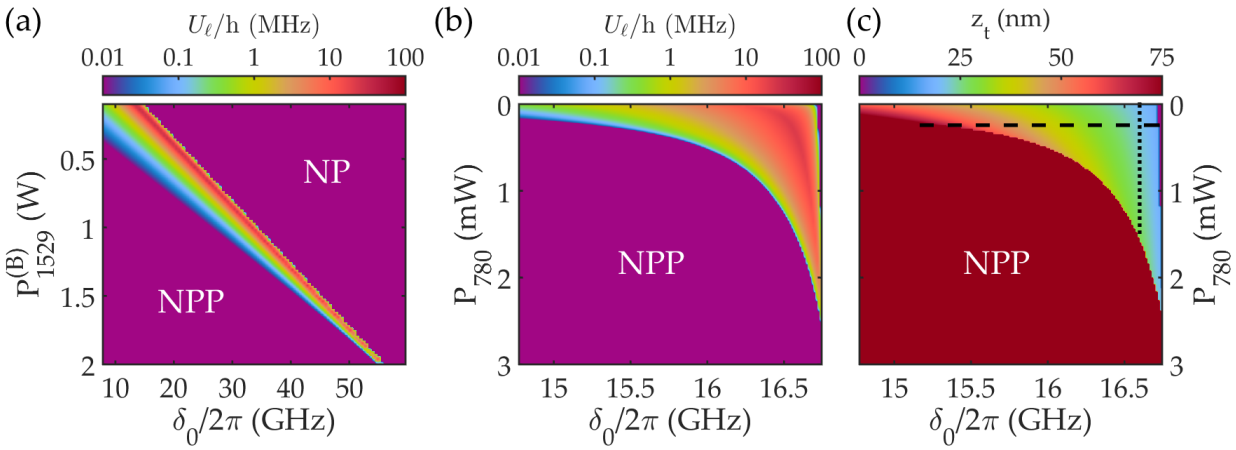


FIGURE 5.15 – **Géométrie du piège 1D : balayage des intensités lasers.** Profondeur du réseau U_ℓ *versus* le désaccord laser à 780 nm et (a) la puissance du laser 1529 et (b) la puissance du laser 780. (c) Scan de la position du piège z_t *vs* les paramètres du laser 780 (désaccord et puissance). Ligne tiretée : z_t varie de 18 à 88 nm en désaccordant $\delta_0/2\pi$ de 15.12 à 16.72 GHz à puissance P_{780} = 0.24 mW constante ; Ligne pointillée : z_t varie de 20 à 28 nm en changeant P_{780} de 10^{-3} à 1.53 mW à désaccord $\delta_0 = 2\pi \cdot 16.60$ GHz constant. NP = Non Piégé. NPP = Non Piégé Périodiquement. Nous prenons ici : $\alpha_{1529} = 7$ pour tous les panels et $P^{(B)}_{1529} = 500$ mW pour (b) et (c).

5.6 Synthèse des résultats et conclusions

Dans un premier temps, nous avons présenté la première étape de notre méthode de piégeage en traitant le cas de la surface plane et stratifiée. Nous avons ainsi pu montrer qu'il était théoriquement possible de piéger des atomes de ^{87}Rb à quelques dizaines de nm de la structure. Les paramètres expérimentaux des lasers (puissances et fréquences) sont des outils avec lesquels la géométrie et les propriétés du piège peuvent être modifiées. En effet, nous avons étudié l'influence de la puissance du laser utilisé pour exciter les plasmons sur les temps caractéristiques du piégeage. Le temps de vie du piège varie de quelques centaines de µs pour une position $z_t = 25$ nm, jusqu'à l'ordre de la seconde lorsque la position du piège est deux fois plus éloignée ($z_t = 50$ nm). Ce temps augmentait avec la puissance optique du laser 1529. Un compromis doit alors être trouvé afin de maximiser le temps de vie du piégeage tout en limitant les effets d'absorption de chaleur par la nanostructure.

Pour le cas structuré à une dimension, nous avons vu que le temps de vie du piège est de l'ordre de la microseconde avec le rang de paramètres choisi dans l'exemple présenté. Ce temps dépend du profil exponentiel que prend la forme de l'état 5P lors de l'excitation plasmonique. Dans le cas du réseau 1D, nous n'avions pas de profil exponentiel entre deux arêtes, ainsi nous avons compensé ce manque en ajoutant un second laser dans la direction opposée. Ce dernier réduit la pente au-dessus d'une arête limitant par conséquent le temps anti-amortissement. D'autres pistes doivent être étudiées afin d'augmenter le temps de vie du piège. En particulier, l'optimisation géométrique a ici été réalisée en maximisant la pente devant une arête diélectrique, ce qui est primordial pour augmenter la profondeur du réseau. Il serait intéressant de considérer également le gradient d'intensité entre deux arêtes et d'étudier l'influence des angles d'incidence des lasers sur l'augmentation de la pente et par conséquent du temps de vie des atomes dans le réseau. Une autre possibilité pour augmenter τ serait d'ajouter un laser accordable sur la force attractive de Casimir-Polder pour des grandes distances z. Cela peut par exemple être réalisé avec un champ électrique évanescent désaccordé sur le rouge de la transition [Mildner et al., 2018], ce qui pourrait augmenter la profondeur du réseau à larges distances et maintenir un temps de vie élevé.

Dans l'implémentation de notre méthode nous avons pris un profil évanescent pour l'état excité en tirant partie de la résonance plasmonique, ainsi la valeur à l'interface diélectrique/vide fixe une valeur maximale de la pente énergétique. Piéger des atomes à des

distances $z < 15$ nm nécessite des intensités optiques potentiellement endommageantes pour les matériaux ou bien des fréquences proches de la transition atomique qui augmenteront le chauffage par émission spontanée. Pour de telles distances, d'autres profils spatiaux tels qu'une loi en z^{-3} pourraient être une alternative [Chang et al., 2014]. Dans nos simulations, par simplicité nous avons considéré une fréquence de Rabi Ω_R constante pour le laser à 780 nm (*i.e.*, intensité laser homogène). Pour optimiser la méthode, il pourrait être intéressant de créer une variation spatiale de la fréquence de Rabi décroissante (e.g., exponentielle) afin d'augmenter la pente énergétique qui permet de créer la barrière de potentiel. Cela pourrait permettre de piéger les atomes à des distances encore plus proches que celles obtenues ici.

5.7 Summary

This final chapter was dedicated to the trapping method. First we introduced the dressed-atom formalism to describe light-atom interactions. Then we mentioned in section 5.2 the two key points of the trapping method. The first one concerns the transversal trapping which is realized by optical means. Indeed, the 1529nm laser evanescent field profile generated by surface plasmons directly imprints the 5P energy state *via* AC shift. As shown in Fig.5.3, higher the intensity gradient is, more important the atom confinement will be. The second point concerns the longitudinal trapping. The periodic modulation that will create the lattice is done with vacuum forces. The presence of the dielectric grating will modify the CP potential : the interaction energy is higher above a ridge than above a groove. It results in a lattice with a period equal to the grating spacing.

In part 5.3 we presented step by step the calculations of the total trapping potential (5.33). We showed the key point of the method that consists in creating a spatially-varying detuning. We applied the results to the planar case by plotting the different optical and CP potentials in Fig.5.5, along with the total trapping potential. We demonstrated we were able to create a barrier of potential at a position z_b where the 780nm laser (used to couple ground and excited state) is resonant.

In section 5.4 we introduced all the parameters used to characterize the trap. First we demonstrated that we were able to tune the trapping geometry by scanning the experimental parameters (power and frequency of the lasers), which is one great advantage of this method. Then we addressed the trapping timescales by mentioning the different effects that could limit the realization of a trap. First we considered the heating rate Γ_d due to spontaneously emitted photons which directly depends on the excited-state population. We defined τ_s as the exit time resulting from this heating effect (equation (5.55)). It corresponds to the time for the atom to escape the trap, *i.e.*, when its kinetic energy variation equals to the bounding energy in the trap. In section 5.4.7, we presented how we determined the tunneling probability P_t within the Wentzel-Kramers-Brillouin approximation. Indeed, the probability for the atom to escape the trap by crossing the barrier of potential is non-zero. It is given by (5.60) and we noted it was exponentially proportional to the width and height of the barrier. Consequently, it results in a tunneling time $\tau_t \propto (P_t \omega_z)^{-1}$, with the trapping oscillation frequency ω_z, that strongly depends on the trapping geometry. Another effect was studied in section 5.4.8 corresponding to the anti-damping phenomenon when we take into account non-adiabatic corrections to the atom velocity. The corresponding time τ_a was found by determining the optical Bloch equations to the first order. We saw this time was inversely proportional to the anti-damping coefficient β, given by (5.73), such as the first-order correction to the trapping force is $F^{(1)} = \beta m v$. In section 5.4.9 we introduced the notion of propagator in order to estimate the transient heating phenomenon. The latter describes the evolution of the non-trapped atom following a spontaneous emission process until it is trapped again. We defined the corresponding time $\tau_c = (P_c \Gamma_d)^{-1}$, with P_c the probability that the atom be lost after its free evolution. All these times led us to define the trapping lifetime

as $\tau = (\tau_s^{-1} + \tau_t^{-1} + \tau_a^{-1} + \tau_c^{-1})^{-1}$. We plotted in Fig.5.11 the evolution of the trapping timescales *vs* the 1529nm power. We observed that the trapping lifetime could be modified with experimental parameters as well. For instance in the planar configuration, we were able to have a lifetime going from hundreds of µs to the second for trapping positions spreading from $z_t = 25$ nm to $z_t = 50$ nm, respectively.

Concerning the structured surface, we proceeded to a similar study in section 5.5. First we demonstrated we were able to create a subwavelength lattice at a position $z_t = 35$ nm from the surface. In the chosen example, the grating period was fixed at $\ell = 100$ nm which also corresponds to the 1D lattice spacing we obtained. With the set of parameters we fixed, we obtained a lifetime in the order of the µs, mostly limited by tunneling effect. This time depends on the exponential profile of the excited state (5P) created by plasmonic resonance. As we saw in Chapter 3 while optimizing the 1D structure geometry, we added a second 1529nm laser in order to have the right decaying intensity profile above a groove. But this laser also reduces the gradient of intensity above a ridge and therefore the anti-damping time, as we discussed in section 5.5.2. Finally in section 5.5.3, we presented how the method allows us to control the geometry of the one-dimensional lattice (see Fig.5.14 and Fig.5.15) by tuning the lasers properties, which act as freedom degrees.

Other studies should be carried on to increase the trapping lifetime in the case of structured potentials. In particular, in our simulations we optimized the gradient of intensity above a ridge but it would be interesting to consider the intensity profile above a groove as well and study how the angles of incidence of lasers affect the 5P slope and consequently the trapping timescales. Another possibility to enhance the trapping method would be to consider a spatially-varying Rabi frequency for the 780nm laser beam (considered constant over space in our numerical simulations) in order to increase the energy slope of the atomic state.

Références

Bader, P., Blanes, S., and Casas, F. (2013). Solving the Schrödinger eigenvalue problem by the imaginary time propagation technique using splitting methods with complex coefficients. *The Journal of Chemical Physics*, 139(12) :124117. 178

Breuer, H.-P. and Petruccione, F. (2002). *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press. 172

Chang, D. E., Sinha, K., Taylor, J. M., and Kimble, H. J. (2014). Trapping atoms using nanoscale quantum vacuum forces. *Nature Communications*, 5 :4343. 176, 181, 184, 186, 193

Cohen-Tannoudji, C. (1971). Atomes "habillés" par des photons optiques ou de radiofréquence. *Journal de Physique Colloques*, 32. 168

Cohen-Tannoudji, C. (1983). Leçons du Collège de France, Cours 6. 183

Dalibard, J. (2013). Leçons du Collège de France, Chaire Atomes et Rayonnement, Cours "Le potentiel dipolaire". 170

Dalibard, J. and Cohen-Tannoudji, C. (1985). Dressed-atom approach to atomic motion in laser light : the dipole force revisited. *Journal of the Optical Society of America B*, 2(11) :1707. 175, 176

González-Tudela, A., Hung, C.-L., Chang, D. E., Cirac, J. I., and Kimble, H. J. (2015). Subwavelength vacuum lattices and atom–atom interactions in two-dimensional photonic crystals. *Nature Photonics*, 9. 171

Griffiths, D. J. D. J. (2005). *Introduction to quantum mechanics*. Pearson Prentice Hall ; 2nd edition. 181

LeVeque, R. J. (2007). *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations*. Society for Industrial and Applied Mathematics. 186

Mildner, M., Horrer, A., Fleischer, M., Zimmermann, C., and Slama, S. (2018). Plasmonic trapping potentials for cold atoms. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 51(13) :135005. 192

Palik, E. D. (1998). *Handbook of optical constants of solids*. Academic Press. 180

Razavy, M. (2003). *Quantum theory of tunneling*. World Scientific. 181

Sakurai, J. J. (1994). *Modern quantum mechanics*. Addison - Wesley. 185

Conclusion

Cette partie nous a permis de détailler la méthode de piégeage que nous proposons pour piéger des atomes en champ proche d'une nanostructure. Dans un premier temps, dans le Chapitre 3, nous avons présenté les optimisations des nanostructures (géométrie et matériaux). Pour cela nous avons établi les critères à respecter pour que la méthode soit expérimentalement réalisable. Cette faisabilité expérimentale fût une ligne directive dans nos simulations théoriques. Nous avons également exprimé les décalages énergétiques des états atomiques qui résultent de l'interaction entre le dipôle atomique et le champ électrique.

Dans le Chapitre 4 nous avons traité les calculs des déplacements des niveaux énergétiques induits par l'interaction entre l'atome et la nanostructure due aux fluctuations quantiques du vide. Ainsi nous avons pu créer une modulation spatiale de l'état fondamental du ^{87}Rb, ce qui permettra de créer le réseau dans lequel les atomes seront piégés.

Finalement, dans le Chapitre 5, nous avons combiné les calculs des deux chapitres précédents afin de calculer le potentiel total de piégeage. Nous avons ainsi pu créer une barrière de potentiel pour empêcher les atomes de tomber sur la surface. Nous avons ensuite traité le cas d'une surface structurée à une dimension afin de moduler ce piège avec une période ℓ = 100 nm. Nous avons ainsi démontré qu'il était possible de créer des potentiels sublongueur d'onde en champ proche d'une nanostructure. Nous avons également estimé les différents effets pouvant limiter le temps de vie du piège, de l'ordre de la µs pour le cas 1D. Certaines optimisations peuvent être envisagées pour augmenter ce temps.

English version

This second part allowed us to show in details the method we proposed to trap atoms in the near field of a nanostructure. First, in Chapter 3, we reported the optimizations of the nanostructures (geometries and materials). To do so, we listed the requirements for the method to be experimentally suitable. Our theoretical simulations were indeed guided by this experimental feasibility. We also gave the energy shifts for atomic states resulting from the interaction between the dipole moment and the electric field.

In Chapter 4, we calculated the energy shifts induced by quantum fluctuations between an atom and a nanostructure. Thus we were able to spatially modulate the ground-state potential of a ^{87}Rb atom, which will create the lattice to trap atoms.

Finally, in Chapter 5, we combined calculations from both previous chapters in order to calculate the trapping potential. We managed to create a barrier of potential to prevent the atoms from crashing into the surface. Then we dealt with the case of the one-dimensional structure to modulate the trap with a lattice period ℓ = 100 nm. We demonstrated it was possible to generate subwavelength potentials in the near field of a nanostructure. We also estimated the different effects that could limit the trapping lifetime, which was about 1 µs for the 1D case. Further optimization should be investigated to increase this lifetime.

Conclusion générale

Cette thèse avait pour but le refroidissement d'atomes jusqu'au régime de dégénérescence quantique et l'implémentation d'une nouvelle méthode de piégeage en champ proche d'une surface nanostructurée.

Ainsi la première partie de ce manuscrit est dédiée aux résultats expérimentaux de ces trois années de doctorat. Pour cela nous avons introduit au cours du Chapitre 1 les notions du phénomène de condensation d'un gaz d'atomes froids ainsi que le piégeage d'atomes dans des potentiels lumineux structurés, *i.e.*, des réseaux optiques. Nous avons pu introduire le contexte dans lequel s'inscrivait le projet AUFRONS, notamment la façon dont il se démarquait des expériences de simulateur quantique courantes. En effet, l'idée de ce projet est de réaliser des réseaux sublongueur d'onde pour atteindre des régimes d'énergie et de dynamique intéressants, et encore peu étudiés. Ainsi un des objectifs est l'étude des interactions entre les atomes mais également entre les atomes et les modes de la nanostructure. Pour cela il est crucial de refroidir les atomes jusqu'au régime de dégénérescence quantique afin de les charger dans le réseau.

Pour cela nous avons mis en place une séquence expérimentale, explicitée au Chapitre 2, composée de différentes étapes (MOT, mélasse optique, pièges magnétique et dipolaire, refroidissement par évaporation, etc...). Plusieurs soucis techniques (e.g., courants de Foucault, fuites) ont limité le refroidissement du nuage atomique. Après de multiples changements, nous avons finalement obtenu un nuage d'atomes très froid. La caractérisation quantitative n'a pu être réalisée en raison des limites du système d'imagerie. Cependant, nous avons présenté une argumentation qualitative qui tend à confirmer l'obtention d'un condensat de Bose-Einstein (BEC). Afin de s'assurer de la validité de la caractérisation de la séquence de refroidissement, nous avons calibré le nombre d'atomes de manière absolue, en imageant des nuages denses. Obtenir un condensat s'avère crucial pour charger les atomes dans un réseau optique, notamment en respectant les conditions d'adiabaticité introduites au Chapitre 1.

Sur la séquence expérimentale actuelle, quelques modifications ont été réalisées sur certaines étapes pour faciliter le refroidissement (e.g., installation d'un piège dipolaire croisé). De plus un nouveau système d'imagerie a été installé en vue de détecter les atomes lorsqu'ils seront piégés dans un réseau sublongueur d'onde. La méthode d'imagerie que nous utiliserons (non détaillée dans ce manuscrit) s'inspire des techniques de super-résolution en biologie pour contourner la limite de diffraction, comme quelques autres méthodes existantes [McDonald et al., 2018; Sherson et al., 2010; Subhankar et al., 2018]. L'idée est d'activer sélectivement les atomes sur chaque site afin de détecter la fluorescence émise et reconstituer l'image des atomes piégés au sein du réseau. La sélection des sites à activer est réalisée en balayant un faisceau laser sur une certaine gamme de fréquence afin qu'il soit résonant pour certaines positions (*i.e.*, les positions des sites du réseau). Par ailleurs ce système d'imagerie permettra de caractériser les petits nuages obtenus lors de la séquence de refroidissement, notamment le BEC. En outre une perspective du projet AUFRONS vise à refroidir du ^{40}K (espèce fermionique) pour simuler le comportement d'électrons dans un cristal par exemple. Cette espèce atomique présente des fréquences de transition proches de celles du ^{87}Rb. Ainsi la séquence expérimentale mise en place pour le refroidissement de ce dernier peut *a priori*

se transposer au refroidissement du potassium.

La seconde partie de ce manuscrit était consacrée aux simulations théoriques de la méthode de piégeage sublongueur d'onde que nous proposons [Bellouvet et al., 2018]. Cette méthode tire partie des forces optiques et des forces du vide, dont les caractéristiques ont été présentées aux Chapitre 3 et 4, respectivement. Dans le Chapitre 5, nous avons décrit et analysé la méthode qui permettrait de piéger des atomes en champ proche d'une surface nanostructurée. Les propriétés du piège formé telles que les profondeurs transverse et longitudinale (*i.e.*, du réseau) obtenues avec cette méthode peuvent être modifiées sur des grandes échelles pour simuler des hamiltoniens de Hubbard (0 - 400 E_r). Les paramètres du réseau sont ajustés expérimentalement en modifiant les fréquences et intensités des faisceaux lasers. Par ailleurs, ces derniers sont très bien contrôlés en laboratoire. La géométrie considérée dans cette thèse nous a permis d'obtenir un réseau à une dimension. Cependant cette méthode peut s'étendre simplement au cas d'un réseau sublongueur d'onde à deux dimensions à l'aide d'une surface structurée à 2D (avec un réseau de piliers par exemple). Le prix à payer est l'augmentation de la complexité numérique des simulations de la réponse optique de la nanostructure. Les algorithmes pour les calculs 2D basés sur la RCWA ont déjà été développés [Moharam, 1988] et sont par exemple disponibles sur des logiciels tel que Reticolo [Hugonin and Lalanne, 2005].

Dans cette étude, le choix des matériaux fut guidé par : un indice de réfraction du substrat élevé pour générer les plasmons de surface (SPs), une faible absorption à 1529 nm pour éviter d'endommager la surface et l'existence d'un protocole de nanofabrication pour réaliser les nanostructures. Aux longueurs d'onde considérées dans ces travaux, les indices du Si et du SiO_2 présentent une absorption nulle [Palik, 1998] ainsi qu'un indice élevé (n_{Si}=3.48). La géométrie de la surface structurée à 1D fût optimisée en tenant en compte d'une technique de nanofabrication (gravure assistée par métal, MACE pour *Metal-Assisted Chemical Etching* en anglais) qui permet de créer des réseaux de nanopiliers avec des hauteurs de quelques dizaines de nm jusqu'au micromètre [Kara et al., 2016]. D'autres améliorations peuvent être apportées sur le choix des matériaux afin d'optimiser la géométrie de piégeage.

Dans cette thèse nous avons présenté une méthode de piégeage que nous avons appliquée numériquement pour piéger des atomes en champ proche de nanostructures. Nous avons présenté les cas d'une surface plane et d'une surface structurée à une dimension afin de générer un potentiel périodique sublongueur d'onde. Dans les deux cas nous avons démontré que les propriétés du piège (distance atome-surface, fréquence et profondeur de piège) peuvent être ajustées sur une large gamme en variant simplement les fréquences et/ou les puissances des deux lasers. Concernant la structure plane et stratifiée, nous avons simulé les différentes contributions des effets entraînant la perte des atomes du piège. Nous avons obtenu des temps de vie de l'ordre de la centaine de ms. Dans le cas de la nanostructure 1D, nous avons calculé le potentiel d'interaction Casimir-Polder pour tirer avantage de la modulation résultante et créer le réseau sublongueur d'onde. Les temps de vie obtenus sont assez faibles mais peuvent être augmentés en optimisant la géométrie ou en tirant partie de la dépendance spatiale de l'intensité laser à 780 nm. Nous avons montré que les profondeurs transversale et longitudinale pouvaient être ajustées en contrôlant les paramètres des lasers. Dans cette étude nous avons fixé la période à 100 nm mais cette dimension peut être réduite jusqu'à quelques dizaines de nm. De plus ces simulations ont été développées pour du ^{87}Rb mais peuvent être étendues aux atomes alcalins dont les transitions de l'état excité sont comprises dans le rang 1–1.6 µm, pour lesquelles l'absorption du Si est faible. D'autres matériaux tel le GaP pourraient être utilisés car ce dernier possède un fort indice et une très faible absorption au dessus de 550 nm. Par ailleurs ce type de matériau peut être intéressant pour inclure d'autres atouts optiques tel qu'un guide d'onde afin d'étudier des modes de surfaces guidés pour les interactions à longue portée par voie optique [González-Tudela et al., 2015; Hood et al., 2016].

En façonnant la surface, diverses géométries sont possibles afin d'accéder à une large gamme de géométrie de réseau. Il est par exemple possible de retirer un ou plusieurs piliers pour simuler la présence d'impuretés en physique du solide, l'introduction d'un désordre contrôlé ou le confinement de mode optique [Douglas et al., 2015]. On peut par exemple imaginer une géométrie qui permettrait de retirer les régions de haute entropie du potentiel [Bernier et al., 2009] pour entrer dans des phases magnétiques ordonnées ou bien une configuration conçue pour briser la symétrie dans des potentiels structurés du type graphène [Semenoff, 1984]. Par ailleurs, cette méthode peut s'appliquer aux nanofibres fuselées [Swaim et al., 2013], aux fibres creuses [Bajcsy et al., 2011] ou encore aux guides d'ondes de lumière lente pour lesquels le piégeage en champ proche augmenterait fortement le couplage atome-photon [Zang et al., 2016]. Par rapport aux approches standards de simulateurs quantiques en champ lointain, ce projet permettrait d'augmenter les énergies mises en jeu au sein du réseau et de concevoir de nouveaux types de diagrammes de bande qui pourraient présenter des transitions de phase quantiques. Le transport et le confinement des atomes en champ proche de modes de surfaces confinés pourraient mener à des couplages importants [Goban et al., 2014] dont il serait possible de tirer profit pour réaliser des interactions à longue portée [Landig et al., 2016].

Les systèmes hybrides quantiques permettent donc de combiner les avantages de systèmes quantiques uniques au prix de pouvoir également combiner certains désavantages. Avec notre méthode, le projet AUFRONS tente ainsi de proposer des solutions pour contrôler des atomes en champ proche de surfaces afin d'aborder et d'étudier de nouveaux comportements.

English version

The purposes of this thesis were the cooling of atoms until quantum degeneracy regime and the implementation of a new trapping method in the near field of nanostructured surface.

The first part of this manuscript presented the experimental results we have been acquiring for those three years. Thus in Chapter 1, we introduced notions about condensates of ultracold atoms as well as atoms trapped in optical structured potentials, *i.e.*, optical lattices. We presented the context in which the AUFRONS project has been evolving, especially the way it stands out from other common quantum simulation experiments. Indeed, the idea is to realize subwavelength lattices to reach new interesting scales of energy and dynamics that remain to be further studied. Thus, one of the goals is to study atom-atom interactions but also interactions between atoms and surface modes. To this end, cooling atoms until the quantum degeneracy regime is crucial to load them into the lattice.

To do so, we set the experimental sequence that we detailed in Chapter 2 composed of various steps (MOT, molasses, magnetic and dipole traps, evaporative cooling, etc...). Some technical issues (e.g., Foucault currents, leaks) limited the cooling of atomic gases. Following multiple changes, we finally obtained a very-cold atomic cloud. Because of some limits with the imaging system, the quantitative characterization was not fully carried out. However, we listed qualitative arguments that tend to confirm the Bose-Einstein condensation regime. In order to guarantee the characterization of our data, we calibrated the absolute number of atoms by imaging dense atomic clouds. Having a condensate for loading atoms in lattices is primordial while ensuring adiabaticity conditions introduced in Chapter 1.

In the current experimental sequence, some steps have undergone some changes to enhance cooling (e.g., crossed dipole trap). Furthermore, a new imaging system has been installed to detect individual atoms trapped in subwavelength lattices. The imaging method (not detailed in this manuscript) is inspired from super-resolution techniques in biology to

overcome the diffraction limit, as a few existing methods [McDonald et al., 2018; Sherson et al., 2010; Subhankar et al., 2018]. The idea is to selectively active atoms in each site and collect the fluorescence in order to reconstitute the final image of atoms within the lattice. Selection of sites is realized by the use of a laser that is tuned over a range of frequency so that the laser is resonant for some positions (i.e., corresponding to the sites in the lattice). Moreover, this system will be used to image small atomic clouds, such as the condensate. One perspective of the AUFRONS project aims at cooling ^{40}K (fermionic species) to simulate electron dynamics in a crystal for instance. This species has transition frequencies close to the ones of ^{87}Rb. Consequently, the experimental sequence currently used could be adapted to cool potassium.

The second part of this manuscript was devoted to theoretical simulations about the method for trapping atoms in subwavelength potentials we have proposed [Bellouvet et al., 2018]. This method takes advantage of optical and vacuum forces, whose characteristics were presented in Chapters 3 and 4, respectively. In Chapter 5, we have described and analyzed an experimental method to trap atoms in the near field of a nanostructured surface. The properties of the trap formed with this method such as transverse and longitudinal (*i.e.*, lattice depth) can be tuned over relevant scales to simulate Hubbard hamiltonians (0–400E_r). The lattice parameters are experimentally adjusted by tuning the amplitude and frequency of laser beams, which are variables very well controlled in laboratories. The surface geometry studied in this thesis led to a one-dimensional lattice. But the idea can be straightforwardly extended to generate 2D subwavelength lattices by using two-dimensional periodically-structured surfaces (with a grating of pillars for instance). The price to pay is an increased numerical complexity for the computations of the optical response of the 2D structure. The algorithm for the 2D calculations based on rigorous coupled-wave analysis has already been developed [Moharam, 1988] and is available on software such as Reticolo [Hugonin and Lalanne, 2005].

In this study, the choice of materials was guided by : a high refractive index in order to generate a strong plasmonic enhancement, very low absorption at 1529 nm so as to handle high optical powers and the existence of nanofabrication protocol to produce the nanostructures. At the wavelength considered here (1529 nm), Si and SiO_2 materials have negligible absorption [Palik, 1998] as well as a reasonably high refractive index (n_{Si}=3.48). The 1D geometry used in this paper was also motivated by the existence of a nanofabrication technique (metal-assisted chemical etching) which can create nanopillar arrays with dimensions down to a few tenth of nanometers in diameters and up to a micron in height [Kara et al., 2016]. Further improvement can be carried on the choice of materials to optimize the trapping geometry.

In this manuscript, we have presented the trapping method and numerically applied it to trap atoms in the near field of nanostructures. We emphasized specifically on planar stratified structure and on 1D periodically-structured surface to generate periodic subwavelength potentials. For both cases, we have shown that the trap characteristics (trap-to-surface distance, depth and trapping frequencies) could be adjusted on a large range by simply changing the frequency and/or power of the two dressing lasers. In the case of the stratified medium, we simulated the different contributions to the trap loss and showed that trap lifetime of ~100 ms could be expected. For the case of 1D nanostructures, we calculated the modulation of the Casimir-Polder potential and took advantage of this modulation to generate a subwavelength lattice. The corresponding trapping lifetimes are quite low but could be enhanced by optimizing the surface geometry or by making good use of the spatial dependency of the 780nm laser intensity. We showed that the transverse and longitudinal depths could be adjusted by controlling the dressing-laser parameters. We anticipate that our demonstration of a 100 nm lattice spacing can be extended to smaller sizes as low as a few tenth of nanometers. Our study was developed and adapted to ^{87}Rb but it could be

straightforwardly applied to most alkaline atoms for which the excited-state transition lies in the range 1-1.6 µm where the absorption of Si is low. Other materials such as GaP could also be exploited as it has a high refractive index and a very low absorption above 550 nm. In addition, materials such as GaP could be interestingly used to include other optical functionalities on the surface such as optical waveguides to study surface guided modes for optically-mediated long-range interactions [González-Tudela et al., 2015; Hood et al., 2016].

By nanoshaping the surface, we can access a large variety of lattice geometries. The possibilities include the design of pillar defects to simulate the role of impurities in solid-state physics, the introduction of a controlled disorder or confined optical modes [Douglas et al., 2015]. One could design a geometry that will offer the possibility to remove high-entropy regions from the potential [Bernier et al., 2009] to enter magnetically-ordered phases or a configuration that will create symmetry breaking in graphene-like structures [Semenoff, 1984]. Furthermore, this trapping method can be directly applied to tapered nanofibers [Swaim et al., 2013], hollow-core fibers [Bajcsy et al., 2011] or slow light waveguides for which near-field trapping will strongly increase the atom-photon coupling strength [Zang et al., 2016]. Compared to standard far-field simulators, this project will allow us to raise all the energy scale at play and to engineer novel types of band diagrams that should exhibit complex quantum phases. The confinement and transport of atoms in the near field of confined modes enable to reach high-coupling strengths [Goban et al., 2014] that could be used to engineer long-range interactions [Landig et al., 2016].

Quantum hybrid systems have the capability to combine the advantages of individual systems at the cost of combining the difficulties. With our proposed method, the AUFRONS project attempts to target solutions to control atoms in the vicinity of surfaces where deep and challenging behaviors could be addressed.

Références

Bajcsy, M., Hofferberth, S., Peyronel, T., Balic, V., Liang, Q., Zibrov, A. S., Vuletic, V., and Lukin, M. D. (2011). Laser-cooled atoms inside a hollow-core photonic-crystal fiber. *Physical Review A*, 83(6) :063830. 201, 203

Bellouvet, M., Busquet, C., Zhang, J., Lalanne, P., Bouyer, P., and Bernon, S. (2018). Doubly dressed states for near-field trapping and subwavelength lattice structuring. *Physical Review A*, 98(2) :023429. 200, 202

Bernier, J.-S., Kollath, C., Georges, A., De Leo, L., Gerbier, F., Salomon, C., and Köhl, M. (2009). Cooling fermionic atoms in optical lattices by shaping the confinement. *Physical Review A*, 79(6) :061601. 201, 203

Douglas, J. S., Habibian, H., Hung, C.-L., Gorshkov, A. V., Kimble, H. J., and Chang, D. E. (2015). Quantum many-body models with cold atoms coupled to photonic crystals. *Nature Photonics*, 9(5) :326–331. 201, 203

Goban, A., Hung, C.-L., Yu, S.-P., Hood, J., Muniz, J., Lee, J., Martin, M., McClung, A., Choi, K., Chang, D., Painter, O., and Kimble, H. (2014). Atom–light interactions in photonic crystals. *Nature Communications*, 5 :3808. 201, 203

González-Tudela, A., Hung, C.-L., Chang, D. E., Cirac, J. I., and Kimble, H. J. (2015). Subwavelength vacuum lattices and atom–atom interactions in two-dimensional photonic crystals. *Nature Photonics*, 9(5) :320–325. 200, 203

Hood, J. D., Goban, A., Asenjo-Garcia, A., Lu, M., Yu, S.-P., Chang, D. E., and Kimble, H. J. (2016). Atom-atom interactions around the band edge of a photonic crystal waveguide.

Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 113(38) :10507–12. 200, 203

Hugonin, J.-P. and Lalanne, P. (2005). *Reticolo software for grating analysis, disponible sur https ://www.lp2n.institutoptique.fr/Membres-Services/Responsables-d-equipe/LALANNE-Philippe*. Institut d'Optique, Palaiseau. 200, 202

Kara, S. A., Keffous, A., Giovannozzi, A. M., Rossi, A. M., Cara, E., D'Ortenzi, L., Sparnacci, K., Boarino, L., Gabouze, N., and Soukane, S. (2016). Fabrication of flexible silicon nanowires by self-assembled metal assisted chemical etching for surface enhanced Raman spectroscopy. *RSC Advances*, 6(96) :93649–93659. 200, 202

Landig, R., Hruby, L., Dogra, N., Landini, M., Mottl, R., Donner, T., and Esslinger, T. (2016). Quantum phases from competing short- and long-range interactions in an optical lattice. *Nature*, 532(7600) :476–479. 201, 203

McDonald, M., Trisnadi, J., Yao, K.-X., and Chin, C. (2018). Super-resolution microscopy of cold atoms in an optical lattice. 199, 202

Moharam, M. G. (1988). Coupled-Wave Analysis Of Two-Dimensional Dielectric Gratings. volume 0883, page 8. International Society for Optics and Photonics. 200, 202

Palik, E. D. (1998). *Handbook of optical constants of solids*. Academic Press. 200, 202

Semenoff, G. W. (1984). Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly. *Physical Review Letters*, 53(26) :2449–2452. 201, 203

Sherson, J. F., Weitenberg, C., Endres, M., Cheneau, M., Bloch, I., and Kuhr, S. (2010). Single-atom-resolved fluorescence imaging of an atomic Mott insulator. *Nature*, 467(7311) :68–72. 199, 202

Subhankar, S., Wang, Y., Tsui, T.-C., Rolston, S. L., and Porto, J. V. (2018). A Wavefunction Microscope for Ultracold Atoms. 199, 202

Swaim, J. D., Knittel, J., and Bowen, W. P. (2013). Tapered nanofiber trapping of high-refractive-index nanoparticles. *Applied Physics Letters*, 103(20) :203111. 201, 203

Zang, X., Yang, J., Faggiani, R., Gill, C., Petrov, P. G., Hugonin, J.-P., Vynck, K., Bernon, S., Bouyer, P., Boyer, V., and Lalanne, P. (2016). Interaction between Atoms and Slow Light : A Study in Waveguide Design. *Physical Review Applied*, 5(2) :024003. 201, 203

Annexe A

Structure du ^{87}Rb et du ^{40}K

A.1 Schéma de la structure atomique du ^{87}Rb

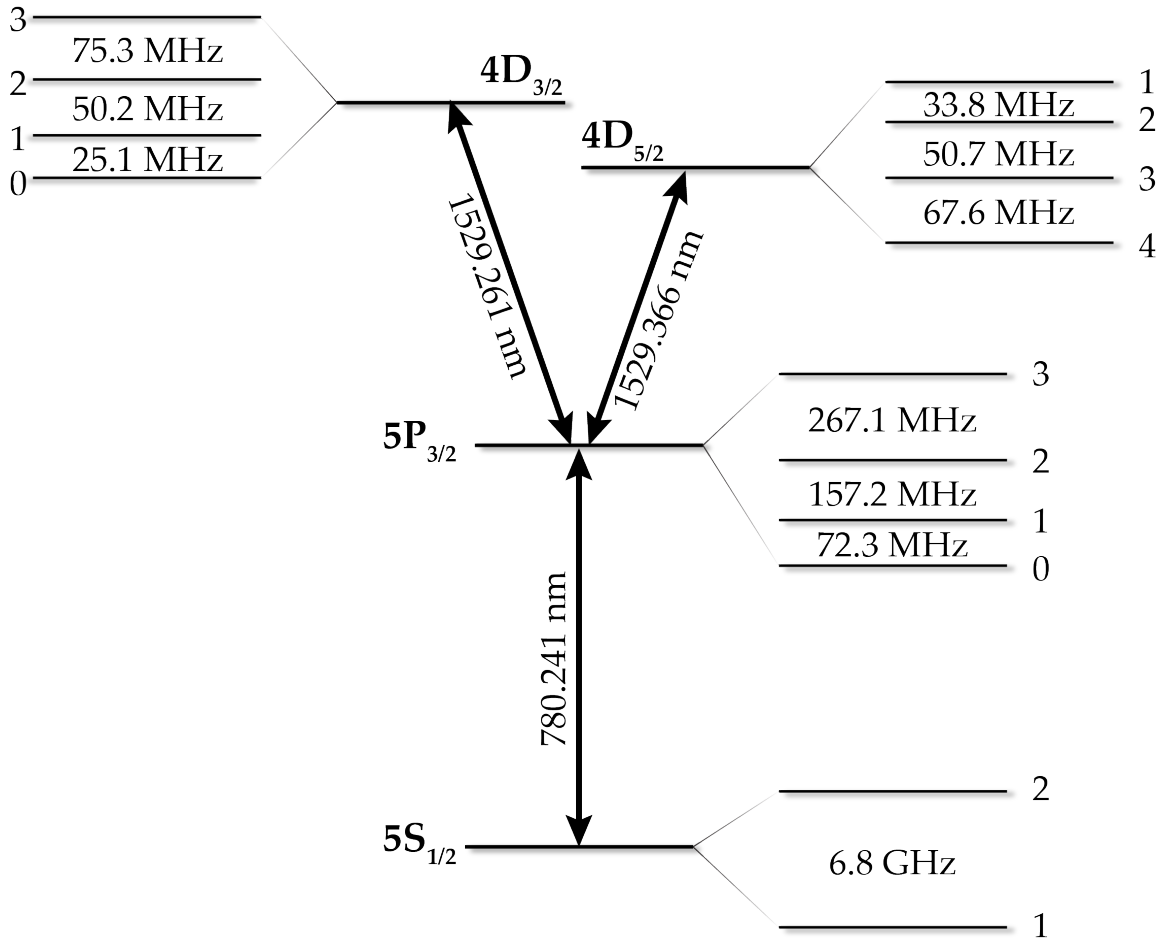


FIGURE A.1 – **Structure atomique fine et hyperfine du ^{87}Rb**, inspirée de [Moon et al., 2007].

A.2 Schéma de la structure atomique du ^{40}K

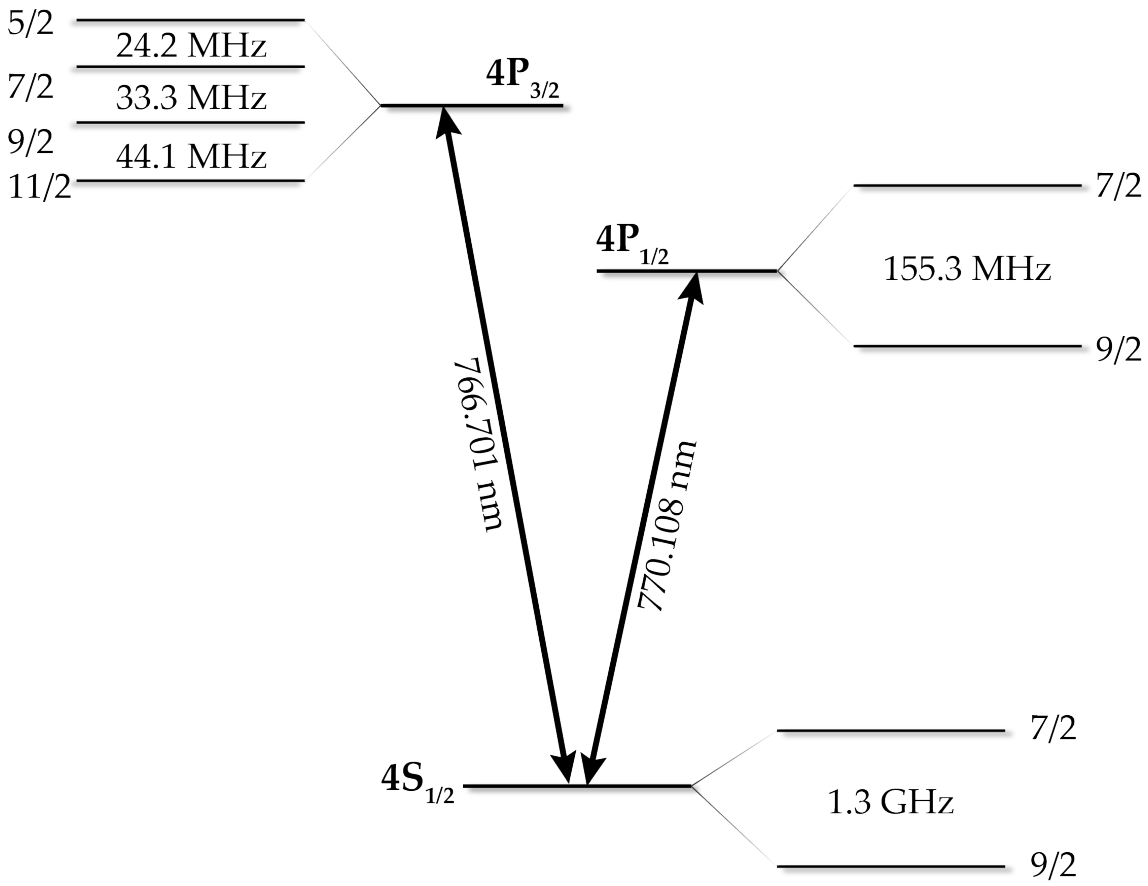


FIGURE A.2 – **Structure atomique fine et hyperfine du ^{40}K**, inspirée de [Tiecke, 2010].

Annexe B

Polarisabilité atomique

Nous présentons ici le calcul de la polarisabilité d'un atome dans un état quelconque.

B.1 Définition

Nous cherchons à déterminer l'expression de $\alpha(\omega)$ qui apparaît dans la relation (3.31). Pour cela on se place dans une approche semi-classique où le champ électrique est traité classiquement et l'atome quantiquement. Nous considérons un atome avec des transitions d'un état fondamental $|g\rangle$ vers un état excité $|e\rangle$, décrit par le hamiltonien $\hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{A}}$ indépendant du temps, dont l'expression est donnée par (3.27). L'évolution de ce dernier est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$\hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{A}}|\psi(t)\rangle = i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle\,, \tag{B.1}$$

où $|\psi(t)\rangle$ est l'état de l'atome et vaut

$$|\psi(t)\rangle = |\psi_g(t)\rangle + \sum_e |\psi_e(t)\rangle\,, \tag{B.2}$$

avec

$$|\psi_n(t)\rangle \propto \mathrm{e}^{-i\mathrm{E}_n t/\hbar}|n\rangle\,, \tag{B.3}$$

où n correspond à un état atomique (g ou e). Nous avons séparé la dépendance temporelle (terme exponentiel) de la dépendance radiale (terme $|n\rangle$).

Ainsi en insérant (B.2) dans (B.1) nous obtenons l'équation aux valeurs propres suivante :

$$\hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{A}}|n\rangle = \mathrm{E}_n|n\rangle\,, \tag{B.4}$$

avec E_n les énergies propres associées aux vecteurs propres $|n\rangle$.

Un champ électrique de la forme $\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}_0^{(+)}\mathrm{e}^{-i\omega t} + \mathbf{E}_0^{(-)}\mathrm{e}^{i\omega t}$ est maintenant appliqué sur l'atome. D'après (3.29), le hamiltonien d'interaction s'écrit

$$\begin{aligned}\hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{AF}} &= -\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r}_{\mathrm{A}},t)\\ &= -\sum_e\left[\mathbf{d}_{ge}\hat{\sigma} + \mathbf{d}_{eg}\hat{\sigma}^\dagger\right]\cdot\left[\mathbf{E}_0^{(+)}\mathrm{e}^{-i\omega t} + \mathbf{E}_0^{(-)}\mathrm{e}^{i\omega t}\right],\end{aligned} \tag{B.5}$$

où l'on rappelle que $\mathbf{d}_{ij} = \langle i|\mathbf{d}|j\rangle$ et $\hat{\sigma} = |g\rangle\langle e|$.

A présent nous allons utiliser la théorie des perturbations dépendante du temps. La perturbation est décrite par le Hamiltonien d'interaction $\hat{\mathscr{H}}_{\mathrm{AF}}(t)$. L'état de l'atome est maintenant une superposition linéaire de différents états atomiques que nous écrivons

$$|\psi\rangle = c_g(t)|\psi_g\rangle + \sum_e c_e(t)|\psi_e\rangle\,, \tag{B.6}$$

où $c_n(t)$ sont des coefficients à déterminer qui respectent la condition de normalisation suivante : $\langle\psi|\psi\rangle = |c_g|^2 + \sum_e |c_e|^2 = 1$. En insérant (B.6) dans l'équation de Schrödinger (B.1) (où nous prenons cette fois-ci le hamiltonien total : $\hat{\mathscr{H}}_A \to \hat{\mathscr{H}}_A + \hat{\mathscr{H}}_{AF}$), nous trouvons

$$\hat{\mathscr{H}}_{AF}\left(c_g|\psi_g\rangle + \sum_e c_e|\psi_e\rangle\right) = i\hbar\left(\dot{c}_g|\psi_g\rangle + \sum_e \dot{c}_e|\psi_e\rangle\right), \tag{B.7}$$

où nous avons utilisé les expressions (B.3) et (B.4) pour annuler certains termes. Par clarté nous avons omis la dépendance temporelle des coefficients $c_n(t)$. D'après les expressions des états atomiques (B.3) et du hamiltonien d'interaction (B.5), nous pouvons réécrire (B.7) sous la forme :

$$-\sum_e \left[\mathbf{d}_{ge}c_e e^{-iE_e t/\hbar}|g\rangle + \mathbf{d}_{eg}c_g e^{-iE_g t/\hbar}|e\rangle\right]\cdot\left[\mathbf{E}_0^{(+)}e^{-i\omega t} + \mathbf{E}_0^{(-)}e^{i\omega t}\right] = i\hbar\left(\dot{c}_g e^{-iE_g t/\hbar}|g\rangle + \sum_e \dot{c}_e e^{-iE_e t/\hbar}|e\rangle\right). \tag{B.8}$$

En projetant (B.8) sur l'état $|g\rangle$ nous avons

$$\dot{c}_g(t) = \frac{i}{\hbar}\sum_e \mathbf{d}_{ge}\cdot\left[\mathbf{E}_0^{(+)}e^{-i(\omega_{eg}+\omega)t} + \mathbf{E}_0^{(-)}e^{-i(\omega_{eg}-\omega)t}\right]c_e(t), \tag{B.9}$$

avec $\omega_{eg} = (E_e - E_g)/\hbar$. A l'inverse en projetant (B.8) sur un état $|e\rangle$ nous trouvons

$$\dot{c}_e(t) = \frac{i}{\hbar}\sum_e \mathbf{d}_{eg}\cdot\left[\mathbf{E}_0^{(+)}e^{i(\omega_{eg}-\omega)t} + \mathbf{E}_0^{(-)}e^{i(\omega_{eg}+\omega)t}\right]c_g(t). \tag{B.10}$$

En supposant une interaction faible entre le champ et l'atome, nous pouvons trouver une solution pour les coefficients $c_n(t)$ au premier ordre de $\mathbf{d}_{ij}\cdot\mathbf{E}_0^{(\pm)}$. Nous avons $c_g^{(0)}(t) = 1$ et $c_e^{(0)}(t) = 0$. Avec (B.9) nous obtenons $c_g^{(1)}(t) = 0$ et (B.10) devient

$$\dot{c}_e^{(1)}(t) = \frac{i}{\hbar}\sum_e \mathbf{d}_{eg}\cdot\left[\mathbf{E}_0^{(+)}e^{i(\omega_{eg}-\omega)t} + \mathbf{E}_0^{(-)}e^{i(\omega_{eg}+\omega)t}\right]. \tag{B.11}$$

Après intégration nous trouvons

$$c_e^{(1)}(t) = \sum_e \mathbf{d}_{eg}\cdot\left[\frac{\mathbf{E}_0^{(+)}}{\hbar(\omega_{eg}-\omega)}e^{i(\omega_{eg}-\omega)t} + \frac{\mathbf{E}_0^{(-)}}{\hbar(\omega_{eg}+\omega)}e^{i(\omega_{eg}+\omega)t}\right]. \tag{B.12}$$

La valeur moyenne du dipôle est donnée par $\langle\mathbf{d}\rangle = \langle\Psi(t)|\mathbf{d}|\Psi(t)\rangle$, soit d'après (B.6) et (B.3),

$$\langle\mathbf{d}(t)\rangle = \sum_e\left[\mathbf{d}_{ge}c_g^*(t)c_e(t)e^{-i\omega_{eg}t} + \mathbf{d}_{eg}c_e^*(t)c_g(t)e^{i\omega_{eg}t}\right]. \tag{B.13}$$

En insérant les solutions au premier ordre $c_g^{(1)}(t) = 1$ et (B.12) dans (B.13), nous trouvons :

$$\langle\mathbf{d}(t)\rangle = \sum_e \mathbf{d}_{ge}\mathbf{d}_{eg}\cdot\left[\frac{\mathbf{E}_0^{(+)}}{\hbar(\omega_{eg}-\omega)}e^{-i\omega t} + \frac{\mathbf{E}_0^{(-)}}{\hbar(\omega_{eg}+\omega)}e^{i\omega t}\right] + \text{c.c.} = \frac{1}{2}\left[\langle\mathbf{d}^{(+)}(\omega)\rangle e^{-i\omega t} + \text{c.c.}\right], \tag{B.14}$$

avec $\langle\mathbf{d}^{(\pm)}(\omega)\rangle$ la valeur moyenne du dipôle dans le domaine des fréquences positives (+) et négatives (-) [1]. Puisque par définition,

$$\langle\mathbf{d}^{(+)}(\omega)\rangle = \boldsymbol{\alpha}_g(\omega)\mathbf{E}_0^{(+)}, \tag{B.15}$$

le tenseur de polarisabilité pour l'état fondamental est donné par

$$\boldsymbol{\alpha}_g(\omega) = \sum_e \frac{2\omega_{eg}\mathbf{d}_{ge}\mathbf{d}_{eg}}{\hbar(\omega_{eg}^2 - \omega^2)}. \tag{B.16}$$

Nous n'avons pas considéré le terme de dissipation dans ce calcul semi-classique. On peut en tenir compte dans l'équation d'évolution de $c_e(t)$ (B.11) en y ajoutant un terme heuristique de la forme $-\frac{\Gamma_e}{2}c_e(t)$, qui caractérise les pertes par émission spontanée avec Γ_e la largeur du niveau excité e. Cela se traduit par un terme supplémentaire aux dénominateurs de (3.32) : $\omega_{eg} \mp \omega \mp i\Gamma_e/2$. La polarisabilité atomique est alors complexe.

1. Par convention on appelle les composantes spectrales de fréquence positive (négative) lorsque les facteurs temporels associés sont du type $e^{-i\omega t}$ ($e^{+i\omega t}$).

B.2 Éléments dipolaires

Il est utile de définir les éléments de couplage entre les états $|\beta\ F\ m_F\rangle$ et $|\beta'\ F'\ m'_F\rangle$ comme le produit d'un coefficient de Clebsch-Gordan et d'un élément de matrice réduit. En utilisant le théorème de Wigner-Eckart [Brink and Satchler, 1962], pour un tenseur $\hat{T}^{(k)}_q$ ($q = 0, \pm 1$ étant la composante et k le rang) nous avons

$$\langle\ \beta\ F\ m_F\ |\hat{T}^{(k)}_q|\ \beta'\ F'\ m'_F\ \rangle = (-1)^{2k}\langle\ \beta\ F\ ||\hat{\mathbf{T}}^{(k)}||\ \beta'\ F'\ \rangle\langle\ F\ m_F\ |\ F'\ m'_F\ ;\ k\ q\ \rangle, \tag{B.17}$$

où $\langle\beta\ F||\ \hat{\mathbf{T}}^{(k)}\ ||\beta'\ F'\rangle$ est l'élément de matrice réduit qui est défini tel que

$$\langle\ \beta\ F\ ||\hat{\mathbf{T}}^{(k)}||\ \beta'\ F'\ \rangle := (-1)^{2k}\langle\ \beta\ F\ m_F\ |\ \beta'\ F\ m_F\ \rangle, \tag{B.18}$$

où la dépendance en F, F′ et $\hat{\mathbf{T}}^{(k)}$ est présente *via* la transformation de β vers β′.

En utilisant maintenant la définition des coefficients de Clebsch-Gordan, encore appelés symbole 3-j [Racah, 1942] :

$$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} := \frac{(-1)^{J_1-J_2+m_3}}{\sqrt{2J_3+1}}\langle J_1, m_1; J_2, m_2|J_3, -m_3\rangle, \tag{B.19}$$

et en notant que $\hat{d}_q$ est un tenseur de rang k=1, nous pouvons réécrire (B.17) sous la forme :

$$\langle\ \beta\ F\ m_F\ |\hat{d}_q|\ \beta'\ F'\ m'_F\ \rangle = \langle\ \beta\ F\ ||\hat{\mathbf{d}}||\ \beta'\ F'\ \rangle(-1)^{F'-1-m_F}\sqrt{2F+1}\begin{pmatrix} F' & 1 & F \\ m'_F & q & -m_F \end{pmatrix} \tag{B.20}$$

où le symbole 3-j est non-nul si $m_F = m'_F + q$. Nous rappelons que $q = -1, 0, +1$ définit les coordonnées dans la base sphérique (cf. définition après relation 3.33). Cette dernière s'avère utile pour traiter les interactions avec les moments angulaires du champ.

Nous pouvons rappeler une seconde relation utile pour le calcul qui va suivre : si nous considérons un moment angulaire total $\hat{\mathbf{J}}$ résultant de la somme deux moments angulaires $\hat{\mathbf{J}}_1$ et $\hat{\mathbf{J}}_2$ agissant sur des degrés de liberté différents, et qu'un opérateur tensoriel de rang k agit uniquement sur les états associés à $\hat{\mathbf{J}}_1$, alors il est possible d'écrire [Racah, 1942]

$$\langle\ J\ ||\hat{\mathbf{T}}^{(k)}||\ J'\ \rangle = \delta_{J_2J'_2}(-1)^{J'+J_1+k+J_2}\sqrt{2J'+1}\begin{Bmatrix} J_1 & J'_1 & k \\ J & J' & J_2 \end{Bmatrix}\langle\ J_1\ ||\hat{\mathbf{T}}^{(k)}||\ J'_1\ \rangle. \tag{B.21}$$

Nous avons ici réduit l'élément de matrice en fonction d'un élément de matrice non-couplé [2]. L'élément { } est appelé symbole 6-j. Par conséquent, puisque le moment dipolaire électrique ne se couple qu'aux électrons le moment angulaire total du noyau est conservé (I=I'), ainsi nous utilisons la relation (B.21) pour écrire

$$\begin{aligned}\langle\ \beta\ F\ ||\hat{\mathbf{d}}||\ \beta'\ F'\ \rangle &\equiv \langle\ L\ J\ I\ F\ ||\hat{\mathbf{d}}||\ L'\ J'\ I\ F'\ \rangle \\ &= (-1)^{F'+J+1+I}\sqrt{2F'+1}\begin{Bmatrix} J & J' & 1 \\ F' & F & I \end{Bmatrix}\langle\ J\ ||\hat{\mathbf{d}}||\ J'\ \rangle.\end{aligned} \tag{B.22}$$

Nous utilisons l'expression du dipôle réduit (B.22) pour réécrire (B.20) de la manière suivante :

$$\begin{aligned}\langle\ \beta\ F\ m_F\ |\hat{d}_q|\ \beta'\ F'\ m'_F\ \rangle &= (-1)^{2F'+J+I-m_F}\sqrt{(2F'+1)(2F+1)} \\ &\times\begin{Bmatrix} J & J' & 1 \\ F' & F & I \end{Bmatrix}\begin{pmatrix} F' & 1 & F \\ m'_F & q & -m_F \end{pmatrix}\langle\ J\ ||\hat{\mathbf{d}}||\ J'\ \rangle,\end{aligned} \tag{B.23}$$

où $\langle\ J\ ||\hat{\mathbf{d}}||\ J'\ \rangle$ est l'élément matriciel dipolaire réduit.

2. Dans certaines références les notations peuvent différer, on retrouve par exemple l'élément réduit que nous avons défini comme $\langle\ J_1\ ||\hat{\mathbf{T}}^{(k)}||\ J'_1\ \rangle$ multiplié par un facteur $\sqrt{2J_1+1}$ dans la référence [Steck, 2001].

Annexe C

Effet tunnel dans l'approximation Wentzel-Kramers-Brillouin

Nous présentons ici l'approximation Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) utilisée pour le calcul de la probabilité par effet tunnel dans la configuration du piège schématisé en Fig.5.9.

C.1 Approximation WKB

C.1.1 Région classique : $z_i < z < z_j$

Nous nous intéressons tout d'abord à écrire la fonction d'onde de l'état fondamental dans la région classique délimitée par les bornes $[z_i, z_j]$, où $E_0 > U(z)$. L'énergie fondamentale a été déterminée en section 5.4.3. L'équation de Schrödinger pour l'état fondamental est donnée par

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_0}{\partial z^2} + U(z)\Psi_0(z) = E_0\Psi_0(z). \tag{C.1}$$

Nous pouvons la reformuler telle que

$$\frac{\partial^2\Psi_0}{\partial z^2} = -\frac{p_0^2(z)}{\hbar^2}\Psi_0(z), \tag{C.2}$$

avec l'impulsion

$$p_0(z) = \sqrt{2m\,[E_0 - U(z)]}. \tag{C.3}$$

Dans la région de potentiel concernée, p_0 est réel (cas classique).

Nous pouvons écrire la fonction d'onde complexe $\Psi_0(z)$ sous la forme

$$\Psi_0(z) = A(z)e^{i\Phi(z)}, \tag{C.4}$$

où $A(z)$ et $\Phi(z)$ sont respectivement l'amplitude et la phase. Ainsi en insérant (C.4) dans (C.2), nous trouvons

$$A'' - \Phi'^2 A + i\left[2\Phi' A' + \Phi'' A\right] = -\frac{p_0^2}{\hbar^2}A. \tag{C.5}$$

La partie imaginaire de la partie gauche de l'équation est donc nulle, soit

$$\begin{aligned} &2\Phi' A' + \Phi'' A = 0 \\ \Leftrightarrow\ &\left(A^2\Phi'\right)' = 0 \\ \Leftrightarrow\ &A = \frac{c}{\sqrt{\Phi'}}, \end{aligned} \tag{C.6}$$

où c est une constante.

Nous effectuons l'approximation suivante : A varie lentement avec z de manière à négliger le terme A''/A devant Φ' et $p_0^2/\hbar^2$ dans l'équation (C.5), ainsi nous avons

$$\begin{aligned} \Phi'^2 &= \frac{p_0^2}{\hbar^2} \\ \Leftrightarrow \quad \Phi' &= \pm\frac{p_0}{\hbar}, \end{aligned} \tag{C.7}$$

soit encore

$$\Phi(z) = \pm\frac{1}{\hbar}\int p_0(z)dz. \tag{C.8}$$

Finalement, en remplaçant l'amplitude et la phase par leurs expressions dans (C.4), nous pouvons écrire la fonction d'onde sous la forme suivante :

$$\Psi_0(z) \simeq \frac{c}{\sqrt{p_0(z)}}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int p_0(z)dz} \tag{C.9}$$

La solution générale de la fonction d'onde fondamentale (dans l'approximation réalisée ici sur A) est une combinaison linéaire des deux termes exponentiels positif et négatif.

C.1.2 Région non-classique : $z_f < z < z_i$

Dans cette région, la probabilité de trouver l'atome est non-nulle. Ce dernier possède alors une quantité de mouvement imaginaire $p_0(z) = i\left|p_0(z)\right|$, ainsi la fonction d'onde prend la forme suivante :

$$\Psi(z) \simeq \frac{c'}{\sqrt{\left|p(z)\right|}}e^{\mp\frac{1}{\hbar}\int|p_0(z)|dz}. \tag{C.10}$$

C.2 Détermination des relation de connexion entre les amplitudes

Dans cette partie, par simplicité nous renversons l'axe de propagation de manière à ce que l'atome évolue vers les z positifs lorsque qu'il subit un effet tunnel. D'après les résultats précédents, nous pouvons écrire la fonction d'onde atomique dans les différentes régions spatiales :

$$\Psi(z) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{p_0(z)}}\left[Ae^{\frac{i}{\hbar}\int_z^{z_i} p_0(z')dz'} + Be^{-\frac{i}{\hbar}\int_z^{z_i} p_0(z')dz'}\right] & \text{si } z < z_i, \quad \text{(C.11a)} \\ \dfrac{1}{\sqrt{\left|p_0(z)\right|}}\left[Ce^{\frac{1}{\hbar}\int_{z_i}^{z}|p_0(z')|dz'} + De^{-\frac{1}{\hbar}\int_{z_i}^{z}|p_0(z')|dz'}\right] & \text{si } z_i < z < z_f, \quad \text{(C.11b)} \\ \dfrac{1}{\sqrt{p_0(z)}}Ee^{\frac{i}{\hbar}\int_{z_f}^{z} p_0(z')dz'} & \text{si } z > z_f. \quad \text{(C.11c)} \end{cases}$$

Nous cherchons à déterminer les coefficients des amplitudes incidente A et transmise E afin de déterminer la probabilité associée à l'effet tunnel. Or les conditions aux limites habituelles ne peuvent pas être utilisées ici car l'approximation WKB n'est pas correcte aux points z_i et z_f où $U_s(z) = E_g$. Nous schématisons un exemple de la configuration au point z_i en Fig.C.1. Les fonctions $\Psi_{WKB}(z)$ obtenues dans l'approximation WKB (cf. equations (C.11a) et (C.11b)) sont correctes jusqu'à une certaine distance de z_i, et définissent le comportement de l'atome sur les zones bleue et rouge, correspondant à des positions à gauche et à droite de z_i, respectivement.

La fonction d'onde Ψ_P décrit le comportement de l'atome au niveau de la position z_i. Pour déterminer la forme de cette fonction d'onde, nous pouvons linéariser le potentiel de piégeage autour de z_i (trait pointillé noir en Fig.C.1), soit

$$U(z) \sim E_0 + U'(z_i)z, \tag{C.12}$$

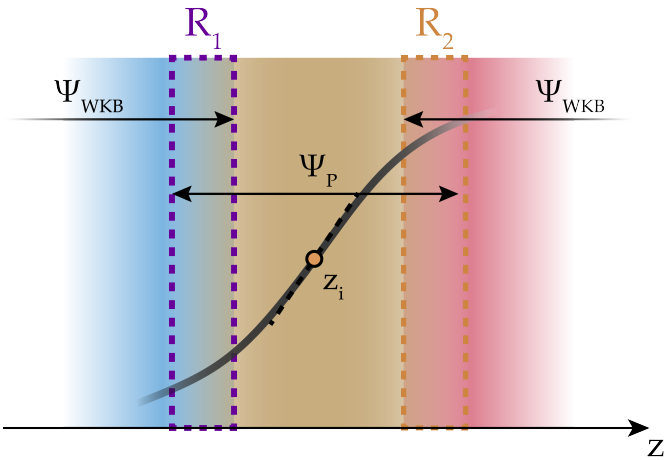


FIGURE C.1 – **Correspondance des fonctions d'ondes au point z_i dans l'approximation WKB.** Les régions classique (bleu) et quantique (rouge) sont décrites par les fonctions Ψ_{WKB} dans l'approximation WKB. Proche du point z_i le potentiel est linéarisé (droite tiretée noir) et l'atome est décrit par la fonction d'onde Ψ_P. Les fonctions d'ondes doivent être égales dans les régions de recouvrements R_1 et R_2 schématisées par les rectangles tiretés violet et orange, respectivement.

où nous avons pris ici l'origine de l'axe (Oz) au point tournant z_i.

L'équation de Schrödinger (C.1) devient alors

$$\frac{\partial^2 \Psi_P}{\partial z^2} = \alpha^3 z \Psi_P(z), \tag{C.13}$$

où nous posons $\alpha = \left[2mU'(z_i)/\hbar^2\right]^{1/3}$. En posant $X = \alpha z$, nous avons une équation de la forme

$$\frac{\partial^2 \Psi_P}{\partial X^2} = X \Psi_P, \tag{C.14}$$

dont les solutions sont une combinaison des fonctions de Airy Ai(X) et Bi(X) [Bender and Orszag, 1978] :

$$\Psi_P(z) = a\mathrm{Ai}(X) + b\mathrm{Bi}(X), \tag{C.15}$$

où a et b sont des constantes à déterminer. Nous utiliserons ici uniquement les formes asymptotiques de ces fonctions, données dans le Tableau C.1. Par ailleurs, dans la région autour de z_i, l'impulsion est donnée par

$$p_0(z) \simeq \hbar\alpha^{3/2}\sqrt{-z}. \tag{C.16}$$

	$X << 0$	$X >> 0$
Ai(X)	$\frac{1}{\sqrt{\pi}(-X)^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}(-X)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right]$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}X^{1/4}} e^{-2X^{3/2}/3}$
Bi(X)	$\frac{1}{\sqrt{\pi}(-X)^{1/4}} \cos\left[\frac{2}{3}(-X)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right]$	$\frac{1}{\sqrt{\pi}X^{1/4}} e^{2X^{3/2}/3}$

TABLEAU C.1 – **Formes asymptotiques des fonctions de Airy.**

A présent, il faut faire correspondre les fonctions d'ondes $\Psi_{WKB}(z)$ et $\Psi_P(z)$ dans les régions de recouvrement R_1 et R_2 pour chaque position z_i et z_f (cf. Fig.C.1).

C.2.1 Position z_i

Nous décalons l'origine de l'axe (Oz) telle que $z_i = 0$.

Région R_1

En notant que l'intégration sur l'impulsion (C.16) donne

$$\int_z^0 p_0(z')dz' \sim \hbar\alpha^{3/2}\int_z^0 \sqrt{-z'}dz' = \frac{2}{3}\hbar(-\alpha z)^{3/2}, \tag{C.17}$$

nous pouvons ré-écrire (C.11a) sous la forme suivante :

$$\Psi_{WKB}(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{\hbar}\left(-\alpha^3 z\right)^{1/4}}\left[Ae^{i\frac{2}{3}(-\alpha z)^{3/2}} + Be^{-i\frac{2}{3}(-\alpha z)^{3/2}}\right], \tag{C.18}$$

En utilisant les asymptotes du Tableau C.1 lorsque $X = \alpha^3 z << 0$, la solution (C.15) donne

$$\begin{aligned}\Psi_P(z) &= \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha z)^{1/4}}\sin\left[\frac{2}{3}(-\alpha z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] + \frac{b}{\sqrt{\pi}(-\alpha z)^{1/4}}\cos\left[\frac{2}{3}(-\alpha z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}(-\alpha z)^{1/4}}\left\{\left[-iae^{i\frac{2}{3}(-\alpha z)^{3/2}+i\frac{\pi}{4}} + iae^{-i\frac{2}{3}(-\alpha z)^{3/2}-i\frac{\pi}{4}}\right] + \left[be^{i\frac{2}{3}(-\alpha z)^{3/2}+i\frac{\pi}{4}} + be^{-i\frac{2}{3}(-\alpha z)^{3/2}-i\frac{\pi}{4}}\right]\right\}.\end{aligned} \tag{C.19}$$

En égalisant les relations (C.18) et (C.19), nous obtenons les expressions suivantes :

$$A = \sqrt{\frac{\hbar\alpha}{\pi}}\left(\frac{-ia+b}{2}\right)e^{i\frac{\pi}{4}}, \tag{C.20a}$$

$$B = \sqrt{\frac{\hbar\alpha}{\pi}}\left(\frac{ia+b}{2}\right)e^{-i\frac{\pi}{4}}. \tag{C.20b}$$

Région R_2

De manière identique, nous pouvons ré-écrire (C.11b) telle que

$$\Psi_{WKB}(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{\hbar}\left(\alpha^3 z\right)^{1/4}}\left[Ce^{\frac{2}{3}(\alpha z)^{3/2}} + De^{-\frac{2}{3}(\alpha z)^{3/2}}\right], \tag{C.21}$$

où nous avons utilisé la relation

$$\int_0^z \left|p_0(z')\right| dz' \sim \hbar\alpha^{3/2}\int_0^z \sqrt{z'}dz' = \frac{2}{3}\hbar(\alpha z)^{3/2}. \tag{C.22}$$

En prenant les asymptotes du Tableau C.1 dans le cas $X >> 0$, la solution (C.15) s'écrit

$$\Psi_P(z) = \frac{a}{2\sqrt{\pi}(\alpha z)^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}(\alpha z)^{3/2}} + \frac{b}{\sqrt{\pi}(\alpha z)^{1/4}}e^{\frac{2}{3}(\alpha z)^{3/2}}. \tag{C.23}$$

En égalisant les relations (C.21) et (C.23), nous obtenons

$$C = \sqrt{\frac{\hbar\alpha}{\pi}}b, \tag{C.24a}$$

$$D = \sqrt{\frac{\hbar\alpha}{\pi}}\frac{a}{2}. \tag{C.24b}$$

En combinant les expressions (C.20) et (C.24), nous avons les formules de connexion entre les différentes régions au point z_i :

$$A = \left[\frac{C}{2} - iD\right]e^{i\frac{\pi}{4}}, \tag{C.25a}$$

$$B = \left[\frac{C}{2} + iD\right]e^{-i\frac{\pi}{4}}. \tag{C.25b}$$

C.2.2 Position z_f

Nous décalons à présent l'origine de l'axe (Oz) tel que $z_f = 0$. En outre, pour déterminer la forme des solutions dans la zone autour de z_f, nous utilisons toujours la linéarisation du potentiel qui donne à présent des solutions de la forme

$$\Psi_{\mathrm{P}}(z) = a\mathrm{Ai}(-\mathrm{X}) + b\mathrm{Bi}(-\mathrm{X}), \tag{C.26}$$

car la pente est maintenant décroissante. De plus l'impulsion est donnée par

$$p_0(z) = \hbar\alpha^{3/2}\sqrt{z}. \tag{C.27}$$

Région R_1

La région R_1 correspond au cas où $z < z_f$. Nous pouvons décomposer l'expression (C.11b) de manière à avoir

$$\Psi_{\mathrm{WKB}}(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{|p_0(z)|}}\left[\mathrm{C}e^{\gamma+\frac{1}{\hbar}\int_{z_f}^{z}|p_0(z')|dz'} + \mathrm{D}e^{-\gamma-\frac{1}{\hbar}\int_{z_f}^{z}|p_0(z')|dz'}\right], \tag{C.28}$$

où nous posons

$$\gamma = \frac{1}{\hbar}\int_{z_i}^{z_f}\left|p_0(z')\right|dz'. \tag{C.29}$$

Afin d'alléger les notations nous définissons les nouvelles notations pour les amplitudes :

$$\mathrm{D}' = \mathrm{C}e^{\gamma}, \tag{C.30}$$
$$\mathrm{C}' = \mathrm{D}e^{-\gamma}. \tag{C.31}$$

De cette manière, la fonction d'onde (C.28) peut se mettre sous la forme

$$\Psi_{\mathrm{WKB}}(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{|p_0(z)|}}\left[\mathrm{D}'e^{\frac{1}{\hbar}\int_0^z|p_0(z')|dz'} + \mathrm{C}'e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^z|p_0(z')|dz'}\right], \tag{C.32}$$

où $z_f = 0$, par définition dans cette partie.

De manière identique au cas précédent, en utilisant la relation (C.27) pour calculer l'expression (C.32) et en insérant les formes asymptotiques des fonctions de Airy lorsque $|\mathrm{X}| >> 0$ dans (C.26), puis en égalisant les deux solutions obtenues, on peut montrer que

$$a = 2\sqrt{\frac{\pi}{\hbar\alpha}}\mathrm{C}', \tag{C.33a}$$
$$b = \sqrt{\frac{\pi}{\hbar\alpha}}\mathrm{D}'. \tag{C.33b}$$

Région R_2

Dans la région de recouvrement R_2 (cas où $z > z_f$), d'après l'expression (C.11b), nous avons

$$\Psi_{\mathrm{WKB}}(z) \simeq \frac{\mathrm{E}}{\sqrt{p_0(z)}}e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^z p_0(z')dz'}. \tag{C.34}$$

En utilisant le calcul de l'intégrale sur (C.27) dans cette expression et en insérant dans (C.26) les formes asymptotiques des fonctions de Airy lorsque $|\mathrm{X}| << 0$, nous obtenons

$$a = i\sqrt{\frac{\pi}{\hbar\alpha}}\mathrm{E}e^{-i\pi/4}, \tag{C.35a}$$
$$b = \sqrt{\frac{\pi}{\hbar\alpha}}\mathrm{E}e^{-i\pi/4}. \tag{C.35b}$$

Par conséquent en combinant les relations (C.33) et (C.35), nous avons les relations de connexion suivantes :

$$C = D' e^{-\Upsilon} = e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{-\Upsilon} E, \tag{C.36a}$$

$$D = C' e^{\Upsilon} = \frac{i}{2} e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{\Upsilon} E. \tag{C.36b}$$

Annexe D

Propagateurs et Lagrangiens

D.1 Définition

Sous l'influence d'un hamiltonien $\hat{\mathscr{H}}$, un état initial $|\alpha, t_0\rangle$ subit une évolution décrite à l'instant t par

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \mathrm{U}(t, t_0)\,|\alpha, t_0\rangle = \mathrm{e}^{-i\hat{\mathscr{H}}(t-t_0)/\hbar}\,|\alpha, t_0\rangle = \sum_{\alpha'} |a'\rangle\,\langle\alpha'|\alpha, t_0\rangle\,\mathrm{e}^{-i\mathrm{E}_{\alpha'}(t-t_0)/\hbar}. \tag{D.1}$$

En appliquant $\langle x'|$ à gauche de cette équation, nous obtenons

$$\langle x'|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{\alpha'} \langle x'|\alpha'\rangle\,\langle\alpha'|\alpha, t_0\rangle\,\mathrm{e}^{-i\mathrm{E}_{\alpha'}(t-t_0)/\hbar}, \tag{D.2}$$

que nous pouvons mettre sous la forme

$$\Psi(x', t) = \sum_{\alpha'} c_{\alpha'}(t_0)\,u_{\alpha'}(x')\mathrm{e}^{-i\mathrm{E}_{\alpha'}(t-t_0)/\hbar}, \tag{D.3}$$

avec $u_{\alpha'}(x') = \langle x'|\alpha'\rangle$ les fonctions propres auxquelles sont associées les valeurs propres α' et $c_{\alpha'}(t_0) = \langle\alpha'|\alpha, t_0\rangle = \int dx'\,u^*_{\alpha'}(x')\Psi(x', t_0)$ les coefficients d'expansion de l'état initial. Ainsi l'équation (D.3) peut se mettre sous la forme

$$\Psi(x'', t) = \int dx'\mathrm{U}(x'', t; x', t_0)\Psi(x', t_0), \tag{D.4}$$

où

$$\mathrm{U}(x'', t; x', t_0) = \sum_{\alpha'} u^*_{\alpha'}(x'')\,u_{\alpha'}(x')\mathrm{e}^{-i\mathrm{E}_{\alpha'}(t-t_0)/\hbar} \tag{D.5}$$

peut être vu comme un opérateur qui agit sur un état initial pour mener à un état final, de manière analogue au tenseur de Green (cf. Chapitre 4) mais pour l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Cet opérateur est appelé propagateur. Nous pouvons également écrire :

$$\mathrm{U}(x'', t; x', t_0) = \langle x''|\,\mathrm{U}(t, t_0)\,|x'\rangle\,, \tag{D.6}$$

où $\mathrm{U}(t, t_0)$ est l'opérateur d'évolution libre donné dans (D.1).

Nous considérons une particule initialement à la position z_0 à l'instant t_0, dont l'évolution est décrite par un hamiltonien $\hat{\mathscr{H}}$. D'après (D.6) le propagateur de la particule s'écrit

$$\mathrm{U}(z, t; z_0, t_0) = \langle z|\,\mathrm{e}^{-i\hat{\mathscr{H}}(t-t_0)/\hbar}\,|z_0\rangle\,. \tag{D.7}$$

Nous découpons l'intervalle de temps $(t - t_0)$ en N sous-intervalles de sorte à ce que $\delta = (t - t_0)/\mathrm{N}$ soit infinitésimal [Bransden and Joachain, 2000]. Nous avons alors

$$\begin{aligned}\mathrm{U}(z, t; z_0, t_0) &= \langle z|\,\mathrm{e}^{-i\hat{\mathscr{H}}\mathrm{N}\delta t/\hbar}\,|z_0\rangle \\ &= \langle z_\mathrm{N}|\,\mathrm{e}^{-i\hat{\mathscr{H}}\delta t/\hbar}\left[\int dz_{\mathrm{N}-1}\,|z_{\mathrm{N}-1}\rangle\,\langle z_{\mathrm{N}-1}|\right]\mathrm{e}^{-i\hat{\mathscr{H}}\delta t/\hbar}\ldots\mathrm{e}^{-i\hat{\mathscr{H}}\delta t/\hbar}\left[\int dz_1\,|z_1\rangle\,\langle z_1|\right]\mathrm{e}^{-i\hat{\mathscr{H}}\delta t/\hbar}\,|z_0\rangle\,,\end{aligned} \tag{D.8}$$

où nous avons utilisé la relation de fermeture $\int dz_i \, |z_i\rangle \langle z_i| = \mathbb{1}$. Nous avons donc

$$\mathrm{U}(z,t;z_0,t_0) = \int \left(\prod_{k=1}^{\mathrm{N}-1} dz_k \right) \langle z_\mathrm{N} | \mathrm{e}^{-i\hat{\mathscr{H}}\delta t/\hbar} | z_{\mathrm{N}-1} \rangle \langle z_{\mathrm{N}-1} | \mathrm{e}^{-i\hat{\mathscr{H}}\delta t/\hbar} | z_{\mathrm{N}-2} \rangle \ldots \langle z_1 | \mathrm{e}^{-i\hat{\mathscr{H}}\delta t/\hbar} | z_0 \rangle . \quad \text{(D.9)}$$

Nous considérons un hamiltonien de la forme

$$\hat{\mathscr{H}} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \mathrm{V}(\hat{z}), \quad \text{(D.10)}$$

où le premier terme est lié à l'énergie cinétique de la particule et le second à l'énergie potentielle à laquelle la particule est soumise.

Le terme δt étant très faible, nous pouvons approximer l'opérateur d'évolution temporelle comme le produit de deux termes :

$$\mathrm{e}^{-i\hat{\mathscr{H}}\delta t/\hbar} = \mathrm{e}^{-i\left(\frac{\hat{p}_z^2}{2m}+\mathrm{V}(\hat{z})\right)\delta t/\hbar} \simeq \mathrm{e}^{-i\frac{\hat{p}_z^2}{2m}\delta t/\hbar} \mathrm{e}^{-i\mathrm{V}(\hat{z})\delta t/\hbar}. \quad \text{(D.11)}$$

Ainsi en considérant un des éléments de (D.9), nous avons

$$\langle z_{k+1} | \mathrm{U}(\delta t) | z_k \rangle = \int dp'_z \, \langle z_{k+1} | \mathrm{e}^{-i\hat{p}_z^2\delta t/(2m\hbar)} | p'_z \rangle \langle p'_z | \mathrm{e}^{-i\mathrm{V}(\hat{z})\delta t/\hbar} | z_k \rangle . \quad \text{(D.12)}$$

En notant que

$$\langle z | p_z \rangle = \frac{\mathrm{e}^{ip_z z/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \quad \text{(D.13)}$$

nous obtenons

$$\langle z_{k+1} | \mathrm{U}(\delta t) | z_k \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \mathrm{e}^{-i\mathrm{V}(z_k)\delta t/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp'_z \mathrm{e}^{ip'_z\delta z_k/\hbar - ip'^2_z\delta t/(2m\hbar)}, \quad \text{(D.14)}$$

avec $\delta z_k = z_{k+1} - z_k$.

Nous pouvons réécrire (D.14) sous la forme :

$$\langle z_{k+1} | \mathrm{U}(\delta t) | z_k \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \mathrm{e}^{im\delta z_k^2/(2\hbar\delta t)} \mathrm{e}^{-i\mathrm{V}(z_k)\delta t/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp'_z \mathrm{e}^{-i(p'_z - m\delta z_k/\delta t)^2\delta t/(2m\hbar)}, \quad \text{(D.15)}$$

ou bien, puisque nous intégrons de $-\infty$ à $+\infty$,

$$\langle z_{k+1} | \mathrm{U}(\delta t) | z_k \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \mathrm{e}^{im\delta z_k^2/(2\hbar\delta t)} \mathrm{e}^{-i\mathrm{V}(z_k)\delta t/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp'_z \mathrm{e}^{-ip'^2_z\delta t/(2m\hbar)}. \quad \text{(D.16)}$$

L'intégrale n'étant pas strictement convergente, nous utilisons l'astuce mathématique suivante :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-i\alpha x^2} = \lim_{\beta\to 0} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-(\beta+i\alpha)x^2} = \lim_{\beta\to 0} \sqrt{\frac{\pi}{\beta + i\alpha}} = \sqrt{\frac{\pi}{i\alpha}}. \quad \text{(D.17)}$$

En remplaçant ce résultat dans (D.16), nous obtenons

$$\begin{aligned} \langle z_{k+1} | \mathrm{U}(\delta t) | z_k \rangle &= \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar\delta t}} \mathrm{e}^{im\delta z_k^2/2\hbar\delta t} \mathrm{e}^{-i\mathrm{V}(z_k)\delta t/\hbar} \\ &= \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar\delta t}} \mathrm{e}^{i\left(m\dot{z}_k^2/2 - \mathrm{V}(z_k)\right)\delta t/\hbar}, \end{aligned} \quad \text{(D.18)}$$

avec la vitesse $\dot{z}_k = \frac{\delta z_k}{\delta t}$. Nous pouvons mettre (D.18) sous la forme

$$\langle z_{k+1} | \mathrm{U}(\delta t) | z_k \rangle = \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar\delta t}} \mathrm{e}^{i\mathscr{L}(z_k,\dot{z}_k)\delta t/\hbar}, \quad \text{(D.19)}$$

où nous avons introduit le lagrangien classique du système [Torby, 1984] :

$$\mathscr{L}(z_k, \dot{z}_k) = \frac{1}{2} m \dot{z}_k^2 - \mathrm{V}(z_k) = m\dot{z}_k^2 - \hat{\mathscr{H}}. \tag{D.20}$$

Avec cette expression, le propagateur total (D.9) s'écrit alors

$$\mathrm{U}(z, t; z_0, t_0) = \left(\frac{m}{i2\pi\hbar\delta t}\right)^{\mathrm{N}/2} \int \left(\prod_{k=1}^{\mathrm{N}-1} dz_k\right) \left(\prod_{k=0}^{\mathrm{N}-1} \mathrm{e}^{i\mathscr{L}(z_k, \dot{z}_k)\delta t/\hbar}\right). \tag{D.21}$$

Cette équation signifie que l'amplitude de probabilité pour que le système aille de la position z_i à z_f en un temps $t - t_0$ correspond à la somme de toutes les amplitudes des chemins classiques possibles. La phase correspond alors à l'action du système [Landau and Lifshitz, 1980]

$$\lim_{\mathrm{N}\to\infty} \sum_{k=0}^{\mathrm{N}-1} \mathscr{L}(z_k, \dot{z}_k)\delta t = \int_{t_0}^{t} \mathscr{L}(z, \dot{z})\, dt' = \mathscr{S}\left[z(t)\right]. \tag{D.22}$$

Au final, le propagateur (D.21) peut s'écrire

$$\mathrm{U}(z, t; z_0, t_0) = \int \mathscr{D}z\, \mathrm{e}^{i\mathscr{S}[z(t)]/\hbar}, \tag{D.23}$$

où nous introduisons la mesure formelle

$$\mathscr{D}z = \left(\frac{m}{i2\pi\hbar\delta t}\right)^{\mathrm{N}/2} \left(\prod_{k=1}^{\mathrm{N}-1} dz_k\right). \tag{D.24}$$

Le résultat (D.23) est appelé **propagateur de Feynman**. Ici, ce dernier a été déterminé en admettant le formalisme de l'équation de Schrödinger, contrairement à Feynman qui avait formulé le calcul de manière inverse [Feynman, 1972], en admettant que le système suivait tous les chemins classiques dont chacun avait une amplitude dont la phase était donnée par l'action classique et dérivait de l'équation de Schrödinger.

D.2 Cas d'une particule libre

Pour une particule libre, dont le hamiltonien est $\hat{\mathscr{H}}_o = \hat{p}_z^2/2m$, le propagateur (D.21) peut se réécrire

$$\mathrm{U}_o(z, t; z_0, t_0) = \left(\frac{m}{i2\pi\hbar\delta t}\right)^{\mathrm{N}/2} \int \left(\prod_{k=1}^{\mathrm{N}-1} dz_k\right) \mathrm{e}^{\frac{im}{2\hbar\delta t}\sum_{k=0}^{\mathrm{N}-1}\delta z_k^2}. \tag{D.25}$$

Si nous considérons uniquement l'intégrale sur z_1, nous avons

$$\begin{aligned}\frac{m}{i2\pi\hbar\delta t}\int_{-\infty}^{+\infty} dz_1 \mathrm{e}^{\frac{im}{2\hbar\delta t}(z_2-z_1)^2} \mathrm{e}^{\frac{im}{2\hbar\delta t}(z_1-z_0)^2} &= \frac{m}{i2\pi\hbar\delta t} \mathrm{e}^{\frac{im}{4\hbar\delta t}(z_2-z_0)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dz_1 \mathrm{e}^{\frac{im}{\hbar\delta t}\left(z_1 - \frac{1}{2}(z_2+z_0)\right)^2} \\ &= \sqrt{\frac{m}{i4\pi\hbar\delta t}} \mathrm{e}^{\frac{im}{4\hbar\delta t}(z_2-z_0)^2},\end{aligned} \tag{D.26}$$

où nous avons utilisé la relation (D.17) pour le calcul de l'intégrale.

En multipliant maintenant ce résultat avec le terme correspondant à l'intégrale sur z_2 nous obtenons

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar\delta t}}\int_{-\infty}^{+\infty} dz_2 \mathrm{e}^{\frac{im}{2\hbar\delta t}(z_3-z_2)^2} \sqrt{\frac{m}{i4\pi\hbar\delta t}} \mathrm{e}^{\frac{im}{4\hbar\delta t}(z_2-z_0)^2} &= \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar\delta t}}\sqrt{\frac{m}{i4\pi\hbar\delta t}} \mathrm{e}^{\frac{im}{6\hbar\delta t}(z_3-z_0)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dz_2 \mathrm{e}^{\frac{i3m}{4\hbar\delta t}\left(z_2 - \frac{1}{3}(2z_3+z_0)\right)^2} \\ &= \sqrt{\frac{m}{i6\pi\hbar\delta t}} \mathrm{e}^{\frac{im}{6\hbar\delta t}(z_3-z_0)^2}.\end{aligned} \tag{D.27}$$

Ainsi en comparant (D.26) et (D.27), nous constatons par itération que le propagateur d'une particule libre (D.25) s'écrit

$$\mathrm{U}_o(z,t;z_0,t_0)=\sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar \mathrm{N}\delta t}}\mathrm{e}^{\frac{im(z_\mathrm{N}-z_0)^2}{2\hbar \mathrm{N}\delta t}}, \tag{D.28}$$

soit encore, dans la limite où $\mathrm{N}\to\infty$,

$$\mathrm{U}_o(z,t;z_0,t_0)=\sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar (t-t_0)}}\mathrm{e}^{\frac{im(z-z_0)^2}{2\hbar (t-t_0)}} \tag{D.29}$$

Ce propagateur décrit ainsi l'évolution d'une particule de la position z_0 à z pendant un temps $t-t_0$.

D.3 Lagrangien d'un atome évoluant dans l'état fondamental

Le Lagrangien classique du système décrit par le hamiltonien (5.79) est donné par

$$\mathscr{L}(z,\dot{z},t)=\frac{1}{2}m\dot{z}^2+\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}(z_t)z. \tag{D.30}$$

D'après (D.23), nous avons

$$\mathrm{U}(z_f,t_f;z_i,t_i)=\int \mathscr{D}z\,\mathrm{e}^{i\mathscr{S}[z(t)]/\hbar}. \tag{D.31}$$

Il nous faut calculer l'action $\mathscr{S}[z(t)]$ pour un chemin arbitraire $z(t)$ qui respecte les conditions $z(t_i)=z_i$ et $z(t_f)=z_f$. Nous définissons un nouveau chemin $x(t)$ tel que

$$z(t)=z_c(t)+x(t), \tag{D.32}$$

qui caractérise la déviation du chemin $z_c(t)$ que prendrait la particule classiquement, avec $z_c(t_i)=z_i$ et $z_c(t_f)=z_f$. Cela signifie que nous avons $x(t_i)=x(t_f)=0$. Avec ces notations, nous écrivons le Lagrangien (D.30) :

$$\mathscr{L}(z_c+x,\dot{z}_c+\dot{x},t)=\underbrace{\frac{1}{2}m\dot{z}_c^2+\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}(z_t)z_c(t)}_{\mathscr{L}(z_c,\dot{z}_c,t)}+\underbrace{\frac{1}{2}m\dot{x}^2}_{\mathscr{L}(x,\dot{x},t)}+\underbrace{m\dot{z}_c\dot{x}+\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}(z_t)x(t)}_{\delta\mathscr{L}}. \tag{D.33}$$

Or le principe de moindre action nous dit que $\delta\mathscr{S}=\int_{t_i}^{t_f}\delta\mathscr{L}\,dt=0$ [Feynman et al., 1964], soit

$$\begin{aligned}\int_{t_i}^{t_f}\delta\mathscr{L}\,dt&=\int_{t_i}^{t_f}\left[m\dot{z}_c\dot{x}+\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}(z_t)x(t)\right]dt\\&=\int_{t_i}^{t_f}\left[m\frac{d}{dt}(\dot{z}_c x(t))-m\ddot{z}_c x(t)+\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}(z_t)x(t)\right]dt\\&=m\left[\dot{z}_c x(t)\right]_{t_i}^{t_f}+\int_{t_i}^{t_f}\left[-m\ddot{z}_c+\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}(z_t)\right]x(t)dt\\&=\int_{t_i}^{t_f}\left[-m\ddot{z}_c+\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}(z_t)\right]x(t)dt,\end{aligned} \tag{D.34}$$

d'après les conditions aux limites de $x(t)$. Par conséquent l'intégrant doit être nul, donc

$$m\ddot{z}_c=-\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}(z_t). \tag{D.35}$$

Nous retrouvons ici la seconde loi de Newton.

Le propagateur (D.31) devient

$$\mathrm{U}(z_f,t_f;z_i,t_i)=\mathrm{e}^{i\mathscr{S}[z_c(t)]/\hbar}\int_{x(t_i)=0}^{x(t_f)=0}\mathscr{D}x(t)\;\mathrm{e}^{i\int_{t_i}^{t_f}\mathscr{L}(x,\dot{x},t)/\hbar}. \tag{D.36}$$

Au vu de l'expression de $\mathscr{L}(x,\dot{x},t)$, nous notons que l'intégrale de (D.36) correspond au propagateur d'une particule libre (D.29) avec $z_0=z=0$, soit

$$\mathrm{U}(z_f,t_f;z_i,t_i)=\sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar\left(t_f-t_i\right)}}\mathrm{e}^{i\mathscr{S}[z_c(t)]/\hbar}. \tag{D.37}$$

Calculons maintenant l'action classique $\mathscr{S}[z_c(t)]$. Nous savons que le chemin classique obéit à la seconde loi de Newton (D.35), ainsi la solution de cette équation est de la forme

$$z_c(t)=z_i+\left(\frac{z_f-z_i}{t_f-t_i}+\frac{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}(z_t)}{2m}(t_f-t_i)\right)t-\frac{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}(z_t)}{2m}t^2, \tag{D.38}$$

dont la vitesse associée est

$$\dot{z}_c(t)=\frac{z_f-z_i}{t_f-t_i}+\frac{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}(z_t)}{2m}(t_f-t_i)-\frac{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}(z_t)}{m}t. \tag{D.39}$$

Avec ces expressions, et en notant $\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}(z_t)\equiv\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}$ par soucis de clarté, nous écrivons le Lagrangien le long de ce chemin classique :

$$\begin{aligned}\mathscr{L}(z_c,\dot{z}_c,t)&=\frac{1}{2}m\dot{z}_c^2-\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}z_c(t)\\&=\frac{1}{2}m\left[\frac{z_f-z_i}{t_f-t_i}+\frac{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}}{2m}(t_f-t_i)-\frac{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}}{m}t\right]^2-\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}z_i-\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}\left(\frac{z_f-z_i}{t_f-t_i}+\frac{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}}{2m}(t_f-t_i)\right)t+\frac{{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}}^2}{2m}t^2\\&=\frac{1}{2}m\left[\frac{z_f-z_i}{t_f-t_i}+\frac{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}}{2m}(t_f-t_i)\right]^2-\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}z_i-2\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}\left(\frac{z_f-z_i}{t_f-t_i}+\frac{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}}{2m}(t_f-t_i)\right)t+\frac{{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}}^2}{m}t^2.\end{aligned} \tag{D.40}$$

Nous utilisons maintenant cette expression pour calculer l'action classique, autrement dit l'intégrale du Lagrangien sur le temps que parcourt la particule sur le chemin classique, soit

$$\begin{aligned}\mathscr{S}[z_c(t)]&=\int_{t_i}^{t_f}\mathscr{L}(z_c,\dot{z}_c,t)\,dt\\&=\frac{1}{2}m\left[\frac{z_f-z_i}{t_f-t_i}+\frac{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}}{2m}(t_f-t_i)\right]^2\left(t_f-t_i\right)-\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}z_i\left(t_f-t_i\right)\\&\quad-\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}\left(\frac{z_f-z_i}{t_f-t_i}+\frac{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}}{2m}(t_f-t_i)\right)\left(t_f-t_i\right)^2+\frac{{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}}^2}{3m}\left(t_f-t_i\right)^3\\&=\frac{1}{2}m\frac{\left(z_f-z_i\right)^2}{t_f-t_i}-\frac{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}}{2}\left(z_f+z_i\right)\left(t_f-t_i\right)-\frac{{\mathrm{U}'_{5\mathrm{S}}}^2}{24m}\left(t_f-t_i\right)^3.\end{aligned} \tag{D.41}$$

Références

Bender, C. M. and Orszag, S. A. (1978). *Advanced mathematical methods for scientists and engineers I : asymptotic methods and perturbation theory*. McGraw-Hill. IX

Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (2000). *Quantum mechanics*. Prentice Hall. XIII

Brink, D. M. and Satchler, G. R. (1962). *Angular Momentum*. Oxford. V

Feynman, R. P. R. P. (1972). *Statistical mechanics : a set of lectures*. W. A. Benjamin, Inc. XV

Feynman, R. P. R. P., Leighton, R. B., and Sands, M. L. M. L. (1964). *The Feynman lectures on physics, Vol.II*. Addison - Wesley. XVI

Landau, L. D. L. D. and Lifshitz, E. M. E. M. (1980). *Course of Theoretical Physics : Mechanics, Third Edition : Volume 1*. Butterworth-Heinemann. XV

Moon, H. S., Lee, L., and Kim, J. B. (2007). Double-resonance optical pumping of Rb atoms. *Journal of the Optical Society of America B*, 24(9) :2157. I

Racah, G. (1942). Theory of Complex Spectra. II. *Physical Review*, 62(9-10) :438–462. V

Steck, D. A. (2001). Rubidium 87 D Line Data, available at *http ://www.steck.us/alkalidata/*. V

Tiecke, T. G. (2010). Properties of Potassium. II

Torby, B. J. (1984). *Advanced dynamics for engineers*. Holt, Rinehart, and Winston. XV

Résumé

Depuis plusieurs décennies un intérêt est né pour combiner deux systèmes quantiques pour former un système hybride quantique (SHQ) aux qualités qu'il serait impossible d'atteindre avec un seul des deux sous-constituants. Parmi les systèmes quantiques, les atomes froids se distinguent par leur fort découplage de l'environnement, permettant un contrôle précis de leurs propriétés intrinsèques. En outre, les simulateurs quantiques réalisés en piégeant des atomes froids dans des réseaux optiques présentent des propriétés contrôlables (échelle d'énergie, géométrie,...) qui permettent d'étudier de nouveaux régimes intéressants en physique de la matière condensée. Dans cette quête de phases quantiques exotiques (e.g., antiferromagnétisme), la réduction de l'entropie thermique est un défi crucial. Le prix à payer pour atteindre de si faibles température et entropie est un long temps de thermalisation qui limite la réalisation expérimentale. La réduction de la période du réseau est une solution prometteuse pour augmenter la dynamique du système. Les SHQs avec des atomes froids offrent de riches perspectives mais requiert d'interfacer des systèmes quantiques dans des états différents (solide/gaz) à des distances très proches, ce qui reste un défi expérimental.

Le projet AUFRONS, dans lequel s'inscrit cette thèse, vise à refroidir un gaz d'atomes froids jusqu'au régime de dégénérescence quantique puis de transporter et piéger ce nuage en champ proche d'une nanostructure. L'idée est d'obtenir un gaz d'atomes froids piégé dans un réseau bidimensionnel aux dimensions sublongueur d'onde, à quelques dizaines de nm de la structure. Un des objectifs est d'étudier les interactions au sein du réseau mais également le couplage des atomes avec les modes de surface.

Le travail réalisé durant cette thèse se décompose en une partie expérimentale et une partie théorique. Dans la première nous présentons le refroidissement d'atomes de ^{87}Rb jusqu'au régime de dégénérescence quantique. La seconde partie est consacrée aux simulations théoriques d'une nouvelle méthode que nous avons implémentée pour piéger et manipuler des atomes froids à moins de 100 nm d'une nanostructure. Cette méthode, qui tire profit de la résonance plasmonique et des forces du vide (effet Casimir-Polder), permet de créer des potentiels sublongueur d'onde aux paramètres contrôlables. Nous détaillons ainsi les calculs des forces optiques et des forces du vide que nous appliquons au cas d'un atome de ^{87}Rb en champ proche d'une nanostructure 1D.

Mots-clés : système hybride quantique, atomes froids, simulateur quantique, réseau sublongueur d'onde, plasmon, effet Casimir-Polder, méthode de piégeage, champ proche, interaction atome-modes de surface

Abstract

An interest for hybrid quantum systems (HSQs) has been growing up for the last decades. This object combines two quantum systems in order to take advantage of both systems' qualities, not available with only one. Among these quantum systems, ultracold atoms distinguish themselves by their strong decoupling from environment which enables an excellent control of their intrinsic properties. Optical lattice quantum simulators with tunable properties (energy scale, geometry,...) allows one to investigate new regimes in condensed matter physics. In this quest for exotic quantum phases (e.g., antiferromagnetism), the reduction of thermal entropy is a crucial challenge. The price to pay for such low temperature and entropy is a long thermalization time that will ultimately limit the experimental realization. Miniaturization of lattice spacing is a promising solution to speed up the dynamics. Engineering cold atom hybrids offers promising perspectives but requires us to interface quantum systems in different states of matter at very short distances, which still remains an experimental challenge.

This thesis is part of the AUFRONS project, which aims at cooling down an atomic gas until the quantum degeneracy regime then transport and trap this cloud in the near field of a nanostructure. The idea is to trap cold atoms in a two-dimensional subwavelength lattice, at a few tenth of nm away from the surface. One goal is to study atom-atom interactions within the lattice but also atom-surface modes coupling.

The work realized during this thesis splits into an experimental part and a theoretical part. In the first one, we present the cooling of ^{87}Rb atoms until the quantum degeneracy regime. The second part is dedicated to theoretical simulations of a new trapping method we have implemented to trap and manipulate cold atoms below 100 nm from structures. This method takes advantage of plasmonic resonance and vacuum forces (Casimir-Polder effect). It allows one to create subwavelength potentials with controllable parameters. We detail the calculations of optical and vacuum forces to apply them to an atom of ^{87}Rb in the vicinity of a 1D nanostructure.

Keywords : hybrid quantum system, cold atoms, quantum simulator, subwavelength lattice, plasmon, Casimir-Polder effect, trapping method, near field, atom-surface mode interaction