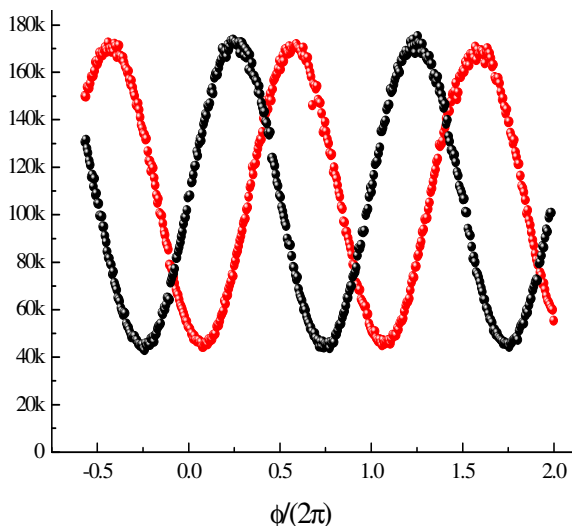
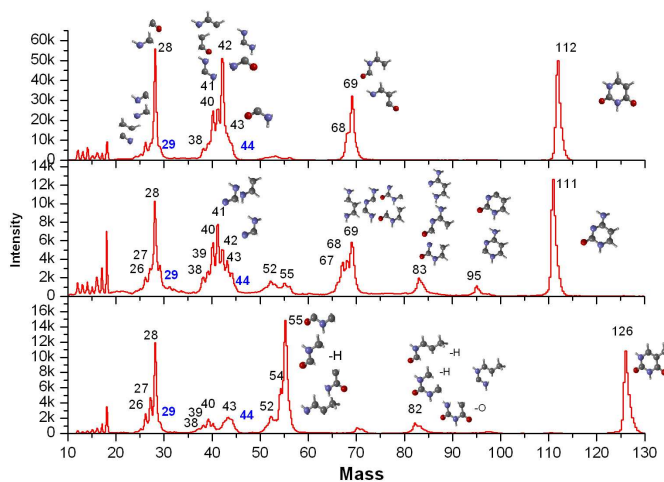
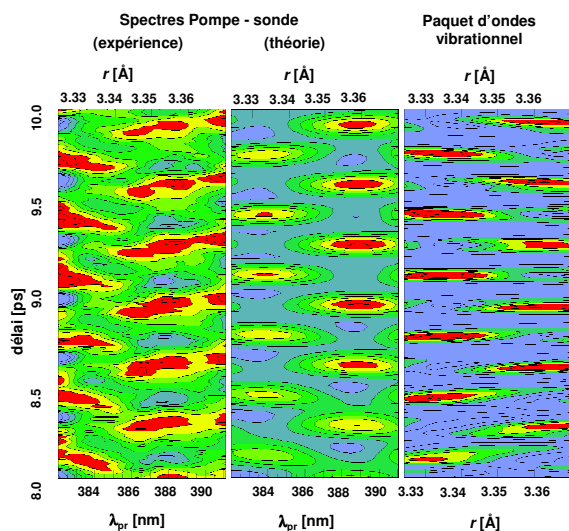


Laboratoire Collisions, Agrégats, Réactivité
UMR 5589 (CNRS – Université Paul Sabatier Toulouse 3)

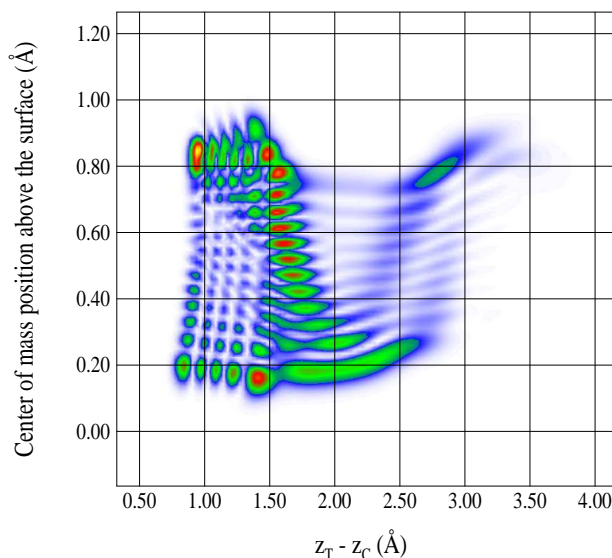
appartenant à
l'IRSAMC - Fédération de Recherche de Physique et Chimie Fondamentales (FR 2568)

Rapport d'activité

2002-2005



Eigenstate 106 (0.832 eV, 0.10 ps)



Légendes de la page 1 de couverture

Haut – gauche : Réseau d'ondes stationnaires transitoires résultant de l'interférence de deux paquets d'onde se croisant dans un puits de potentiel moléculaire (coll. Equipes « Théorie », « Femtos » et K. Ohmori (IMS, Okazaki)).

Haut – droit : Spectres de fragmentation de l'Uracil, Cytosine et Thymine par collisions de protons de 100 keV d'énergie.

Bas – gauche : "Franges d'interférences atomiques avec le lithium : l'application d'un champ électrique sur un seul des faisceaux atomiques dans l'interféromètre introduit un déphasage entre la courbe noire ($E = 0$) et la courbe rouge ($E = 6 \times 10^4$ V/m) et ces signaux donnent une valeur très précise de la polarisabilité atomique."

Bas – Droit : Piégeage et dissociation de H_2 (ici, l'isotope tritium) sur des surfaces carbonées. Cas dissociatif : état ($n=4$, $N=14$) avec beaucoup d'énergie ($n=4$) dans la vibration interne T-C, "fuyant" dans le continuum (sommet de la barrière à $z = 1.8$ Å).

Contractualisation vague A 2007-2010

**2.2.C - Dossier de demande de reconnaissance
d'une unité de recherche auprès du ministère
et éventuellement d'association à un EPST ou EPIC**

Fichier UR1 : Identification, moyens, dossier scientifique

Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité UMR 5589

Directeur : Bertrand GIRARD

Département de physique

Université Paul Sabatier / CNRS

Date et signature du responsable de la demande :

Partie à remplir par le responsable de ou des établissement(s) demandeur(s) :

Je donne mon accord à la présente demande :

de reconnaissance par le ministère

d'association à l'EPST ou EPIC (préciser) : **CNRS**

d'une unité de recherche dans le cadre des dispositions générales et spécifiques au statut de l'unité.

Sous réserve de l'accord de la direction de la recherche et du directeur général de l'EPST ou de l'EPIC concerné, la direction de l'unité serait assurée par :

M Bertrand GIRARD

Nom et prénom du responsable de l'établissement demandeur (**établissement principal**) :

M. Jean François SAUTEREAU

Qualité : Président de l'Université Paul Sabatier, Toulouse 3

Date :

Signature :

I - Structuration et moyens de l'unité faisant l'objet d'une demande de reconnaissance

I.1 - Caractéristiques de la demande de reconnaissance

Établissement faisant cette demande : Université Paul Sabatier à Toulouse X
à titre principal

Label demandé

<i>Demande d'association au</i> CNRS	<i>Label demandé :</i> UMR.
---	-----------------------------

* Cocher ici si l'unité présente parallèlement une demande de reconnaissance d'une ERT interne.

Type de demande

X unité issue d'unité(s) contractualisée(s) (*souligner le type de restructuration*) : renouvellement de l'unité de recherche ; unité issue de l'éclatement d'une ancienne unité reconnue ; fusion de plusieurs unités reconnues ; éclatement-fusion.

Situation antérieure de l'unité

Etablissement principal	Label et n°	Nom du responsable précédent	Intitulé de l'unité	Date de la dernière reconnaissance
UPS	UMR5589	J. Vigué -> 31/12/04 B. Girard au 01/01/2005	LCAR	01/01/2003

Intitulé complet de l'unité

Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité

Responsable

M./Mme	Nom	Prénom	Corps-Grade	Organisme (le cas échéant)	Section du C.N.U. ou de l'organisme
M.	GIRARD	Bertrand	PR1	UPS	30

X J'autorise la diffusion de mon nom sur internet (annuaire des unités de recherche).

Coordonnées officielles de l'unité

- Localisation et établissement : Université Paul Sabatier
- Numéro, voie : 118 route de Narbonne
- Boîte postale :
- Code Postal et ville : 31062 TOULOUSE Cedex 9
- Téléphone : 05 61 55 60 23 Télécopie : 05 61 55 83 17
- Adresse électronique : lcar.dir@irsamc.ups-tlse.fr

Partenaire(s) concerné(s) par la demande (cf. nomenclature)

* Préciser le DS et le secteur disciplinaire principaux et éventuellement secondaires.	Départements Scientifiques MSTP *		Secteurs disciplinaires MSTP *	
	principal	secondaire(s)	principal	secondaire(s)
Ministère	2		231	
CNRS	Départements Scientifiques CNRS *		Sections du comité national	
	20	40	04	31

Mots-clefs MSTP (cf. nomenclature)

Optique, lasers
Nanophysique
Physique atomique et moléculaire
Biophysique
Astroparticules
Matériaux Nanostructurés
Nano-objets
Information quantique

Mots-clefs libres

Interférométrie atomique, atomes froids
Agrégats, Surface, Lasers femtosecondes

Ecole Doctorale de rattachement (établissement, n°, intitulé)

Université Paul Sabatier, n° 322 : Physique et nano-physique de Toulouse

Participation à un programme pluri-formations ou à une structure fédérative (label et n° éventuels, intitulé)

- PPF « Contrôle cohérent calcul quantique » (Responsable : B. Girard) 2003-2006
- FR 2568 Fédération de Recherche de Physique et Chimie Fondamentales, 2003-2006, renouvellement demandé
- PPF « Lasers ultracourts dans le Grand Sud-ouest (Responsable : B. Girard) demandé
- PPF « Molécules et grains : du laboratoire à l'Univers (Responsable C. Joblin) demandé
- PPF « Astroparticules » (Responsable A. Blanchard) demandé

Participation à un Réseau européen (préciser)

- COCOMO (2000-2004) : Coherence and Control in Atoms and Molecules (B Girard)
- XTRA (2004-2008) : X-rays, attosecond and applications (B. Girard)
- NANOCOLD (2001-2004) : Nanodeposition of Active Ordered Structures by Cold Atoms Technologies (J. Weiner)
- FASTNET (2002-2006) : Confinement, Transport and Manipulation of Atoms and Molecules in the Presence of Fields and Surfaces (J. Weiner, coordonnateur)
- EPIC (2002-2005) : Electron an Position Induced Chemistry (J.-P. Ziesel)
- LEIF (2000-2003 et 2006-2009) : Low Energy Ion Beam Facility (A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle)
- RADAM (2003-2007) : Radiation Damage in Biomolecular Systems (P. Moretto-Capelle)

I.2 - Moyens matériels et financiers

I.2.1 - Ressources annuelles de l'unité au cours des quatre dernières années (hors financements récurrents du ministère et des EPST ou EPIC)

1.1.1.1.1.ORIGINE	Moyenne annuelle des 4 dernières années <i>TTC</i>	Taux de TVA*	Remarques éventuelles sur l'évolution
Reversement BQR et ressources supplémentaires provenant de l'établissement	20 750		
Ressources propres (contrats de recherche, prestations...)	158 492		
Collectivités territoriales	27 409		
Communauté européenne	171 039		
Fonds National pour la Science	15 300		
Contrat de Plan Etat-Région	98 960		
Total	491 950		

* Le cas échéant.

I.2.2 - Budget prévisionnel de l'unité pour le prochain contrat

NATURE DES FINANCEMENTS 2007 (TTC)	Crédits demandés par l'établissement principal (moyenne annuelle)	<i>(préciser éventuellement ci-dessous les crédits demandés par les établissements secondaires)</i>	
Crédits demandés au ministère (direction de la recherche) : - Crédits scientifiques (= fonctionnement et équipement) - Vacations Sous-total ministère	140 000		
Crédits demandé à l' EPST ou EPIC de tutelle et éventuellement à d'autres organismes de recherche :	CNRS	Autre EPST/EPIC associé (préciser) :	Autre EPST/EPIC associé (préciser) :
- Fonctionnement général (hors infrastructure)	160 000		
- Infrastructure (convention d'hébergement, ...)			
- Opérations scientifiques	40 000		
- Programmes			
- Gros équipement	40 000		
Sous-total CNRS			
Autres ressources attendues [collectivités, contrats, subventions (autres que collectivités), autres contributions (dons)] y compris CPER			
Total général	380 000		

Pour information :

Crédits attendus dans le cadre du CPER		2006 + 2007	Remarques éventuelles
Part Etat	Ministère	60 980	
	EPST ou EPIC	42 686	
Part Collectivités locales		30 490	
Total		134 156	

I.2.3 – Liste des achats d'équipements souhaités ou programmés pour le prochain contrat

Descriptif et nombre	Coût unitaire	Source de financement (ministère, EPST ou EPIC à préciser ...) *	Coût total En k€ HT
Expériences d'agrégats			
Jouvence laser		ANR non thématique	100
Nouveaux développements		(A) 125 k€	150
Expériences laser femtoseconde			
Lasers de pompe			100
Amplificateur lasers			100
Mise en forme d'impulsion			100
Nouveaux développements			100
Expériences collisions et dopage ion-molécules			
Source d'ions			75
Nouveaux développements			50
Expériences collision ion-surfaces			
Nouveaux développements			50
Expériences interférométrie atomique			
Développements de l'interférométrie		ANR non thématique	50
Construction d'un nouvel interféromètre		(A) 200 k€	400
Expériences de nanolithographie/atomes froids			
Développement en cours			300
Nouveaux projets			500
Projet Biréfringence Magnétique du Vide (hors aimant)			200
Jouvence du matériel à vide (toutes les équipes)			200
Jouvence du matériel électronique (toutes les équipes)			300
Equipement Services Communs			
Machines outils			100
Soudeur et test vide			25
Jouvence du parc de 60 micro-ordinateurs et des imprimantes			125
Nouvelles stations de travail			100
Total			3 125

UNIVERSITE
PAUL
SABATIER



TOULOUSE III

I R S A M C
Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité
UMR 5589 (CNRS - Université de Toulouse 3)



Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité

UMR 5589 (CNRS – Université Paul Sabatier Toulouse 3)

appartenant à

l'IRSAMC - Fédération de Recherche de Physique et Chimie Fondamentales (FR 2568)

Rapport d'activité

2002-2005

Table des matières

1. Organigramme de l'Unité.....	3
2. Message du Directeur de l'Unité.....	7
3. Structure, dynamique et thermodynamique des agrégats.....	21
4. Optique pour tests fondamentaux.....	43
5. Manipulation d'atomes par champs proches issus de nanostructures.....	79
6. Spectroscopie moléculaire ultrarapide et contrôle cohérent.....	91
7. Spectrométrie d'électrons dans les collisions.....	125
8. Interactions Ion-Surface.....	143
9. Théorie des processus dynamiques dans les systèmes moléculaires.....	153
10. Collisions froides électron-molécules à haute résolution avec des photoélectrons synchrotron.....	173
11. Publications de l'ensemble du laboratoire.....	179
12. Les collaborations du LCAR.....	207
13. Bilan financier.....	213
14. Bilan sur l'évolution du personnel de l'Unité.....	219
15. Responsabilités exercées par les membres du LCAR.....	229
16. La formation dans l'Unité.....	233
17. Hygiène et sécurité.....	235
18. Séminaires 2002-2005.....	239

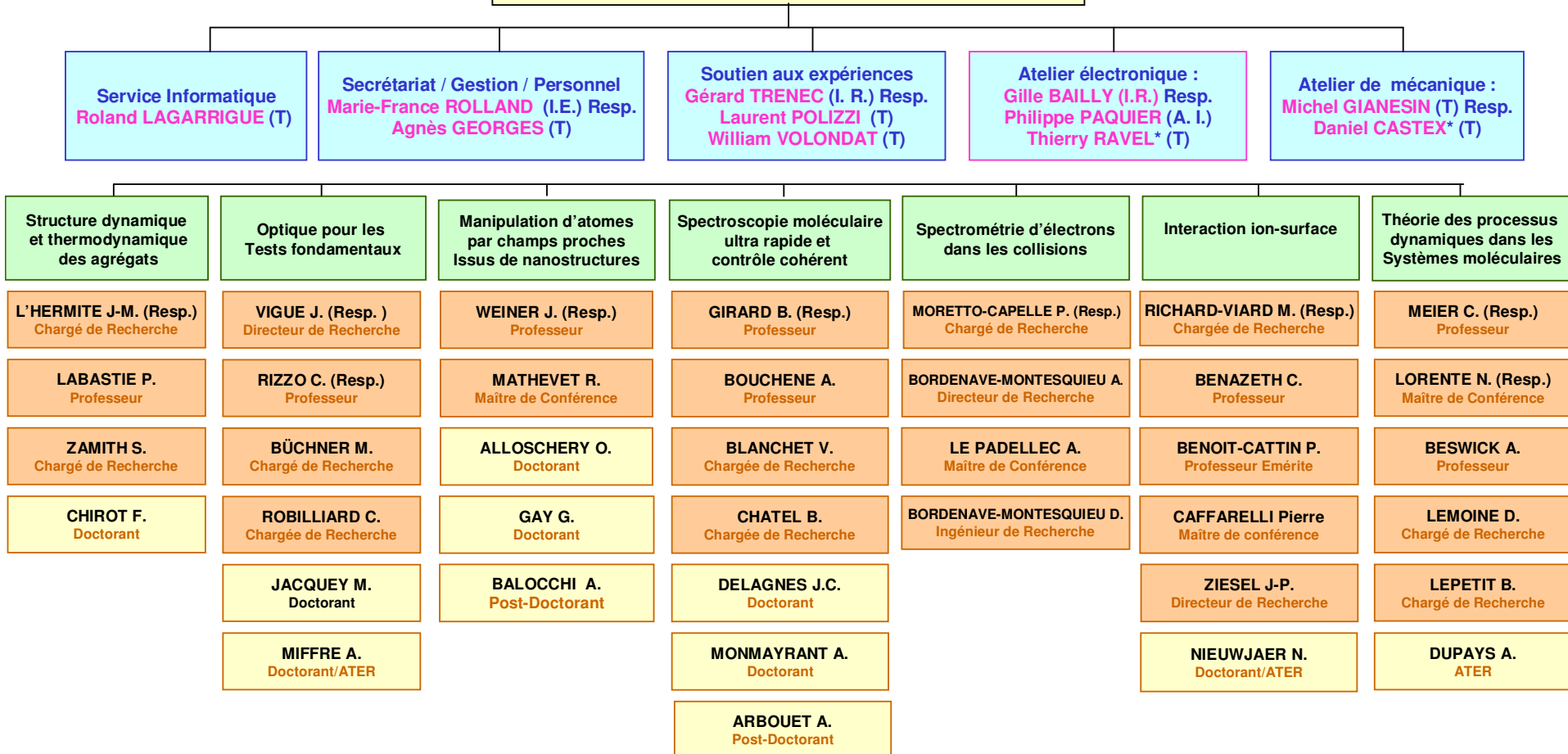
1. Organigramme de l'Unité

Laboratoire Collisions Agrégats Réactivités – UMR 5589 CNRS

1er janvier 2005

Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité

Directeur : Bertrand GIRARD
Sous-directrice : Martine RICHARD-VIARD
 13 chercheurs / 13 enseignant-chercheurs
 10 ITAOS
 8 Doctorants, 3 ATER, 2Post-Doctorants



* Personnels UPS, rattachés à l'IRSAMC

Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité

Directeur : Bertrand GIRARD

Adjointe au directeur : Martine RICHARD-VIARD

11 chercheurs / 14 (dont 1 émérite) enseignant-chercheurs

8 ITA +4 (+1 Irsamc) IATOS

7 Doctorants, 1 ATER, 2 Post-doctorants

Service Informatique
Roland LAGARRIGUE (T)

Secrétariat / Gestion / Personnel
Marie-France ROLLAND (I.E.) Resp.
Agnès GEORGES (T)

Soutien aux expériences
Gérard TRENEC (I. R.) Resp. 50%
Elsa BAYNARD (I.E.) 20%
Stéphane FAURE (I.E.)
Laurent POLIZZI (T)
William VOLONDAT (T)

Atelier électronique :
Gilles BAILLY (I.R.) Resp.
Philippe PAQUIER (A. I.)
Thierry RAVEL* (T)

Atelier de mécanique :
Michel GIANESIN (T) Resp.
Daniel CASTEX (T)

Structure dynamique et thermodynamique des agrégats

Optique pour les Tests fondamentaux

Manipulation d'atomes par champs proches Issus de nanostructures

Spectroscopie moléculaire ultra rapide et contrôle cohérent

Spectrométrie d'électrons dans les collisions

Interaction ion-surface

Théorie des processus dynamiques dans les Systèmes moléculaires

L'HERMITE J-M. (Resp.)
Chargé de Recherche

VIGUE J. (Resp.)
Directeur de Recherche

WEINER J. (Resp.)
Professeur

GIRARD B. (Resp.)
Professeur

MORETTO-CAPELLE P. (Resp.)
Chargé de Recherche

RICHARD-VIARD M. (Resp.)
Chargée de Recherche

MEIER C. (Resp.)
Professeur

LABASTIE P.
Professeur

RIZZO C. (Resp.)
Professeur

MATHEVET R.
Maître de Conférence

BLANCHET V.
Chargée de Recherche

LE PADELLEC A.
Maître de Conférence

BENAZETH C.
Professeur

LORENTE N. (Resp.)
Maître de Conférence

ZAMITH S.
Chargé de Recherche

BÜCHNER M.
Chargé de Recherche

ALLOSCHERY O
Doctorant

CHATEL B.
Chargée de Recherche

LE PADELLEC A.
Maître de Conférence

BENOIT-CATTIN P.
Professeur Emérite

BESWICK A.
Professeur

CHIROT F.
Doctorant

ROBILLIARD C.
Chargée de Recherche

GAY G.
Doctorant

BAYNARD E.
I.E. 80%

LE PADELLEC A.
Maître de Conférence

CAFFARELLI Pierre
Maître de conférence

BOUCHENE A.
Professeur

TRENEC G.
I.R. 50%

DELAGNES J.C.
Doctorant/ATER

LEMOINE D.
Chargé de Recherche

JACQUEY M.
Doctorant

RAFFAEL Kevin
Post-Doctorant

LEPETIT B.
Chargé de Recherche

PINTO DA SOUZA B.
Doctorant

SENCE M.
Maître de conférence

Intégration prochaine dans une équipe

ATHER HASHMI Faheel
Doctorant

BRANDI F.
Post-Doctorant

MONTURET Serge.
Doctorant

* Personnel UPS, rattaché à l'IRSAMC

2. Message du Directeur de l'Unité

Je présente ci-dessous les éléments clés du Laboratoire Collisions, Agrégats, Réactivité (LCAR) : Bilan scientifique, ressources humaines, budgets, locaux. Ces éléments sont repris ensuite dans le document, avec une présentation des activités et projets de chaque équipe, puis un certain nombre de tableaux récapitulatifs et synthèses, « indicateurs » de notre activité de recherches. Au-delà des activités purement scientifiques, je tiens à souligner la très forte implication de quelques membres du laboratoire dans les actions importantes de vulgarisation menées dans le cadre de l'Année Mondiale de la Physique en Midi-Pyrénées (le LCAR gère en particulier tous les financements de l'AMP2005). Ceci est un aspect important de nos missions.

Les résultats scientifiques des équipes du LCAR sont tout à fait remarquables. Citons très brièvement, les premières mesures de précision en interférométrie atomique, de nouveaux résultats en contrôle cohérent basés sur un façonneur d'impulsions haute résolution, les progrès effectués en interaction d'atomes avec des nanostructures, les résultats théoriques nombreux et variés (dynamique de systèmes exotiques, dynamique réactionnelle : gaz/surface, nano-objet – surface, le développement des méthodes de trajectoires Bohmiennes ...), les progrès effectués dans la mise en place du projet de mesure de biréfringence magnétique du vide ainsi que la récente prédiction de la possibilité d'observation de cet effet dans les étoiles à neutrons doubles, les premiers résultats d'interaction de molécules biologiques avec des ions. Enfin, le nouveau projet d'étude des propriétés de collage des agrégats a bien avancé.

Le LCAR fait partie de l'Institut de Recherche sur les Systèmes Atomiques et Moléculaires Complexes (IRSAMC), créé en 1994 et reconnu depuis 2003 comme Fédération de Recherche (de Physique et Chimie fondamentale). L'IRSAMC est composé des quatre laboratoires suivants :

- Laboratoire de Physique Quantique (LPQ)
- Laboratoire de Physique Théorique (LPT)
- Laboratoire de Physique des Solides de Toulouse (LPST)
- Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité (LCAR)

Cette année 2005 a été riche en réflexions, tout autant au niveau du lancement de nouveaux projets scientifiques, que de celui des structures dans lesquels nous évoluons (périmètre de Laboratoire, de Fédération ...). Nous présentons brièvement ci-dessous l'état de la situation.

Dans la vie d'un laboratoire, au-delà des évolutions naturelles des équipes constituées, il est important - sous peine de sclérose - de favoriser l'émergence de projets entièrement nouveaux. Ceux-ci peuvent être portés par des chercheurs déjà présents au laboratoire, tout autant que par de nouveaux arrivants. Les programmes mis en place ces dernières années, et maintenant coordonnés dans le cadre de l'ANR (chaires d'excellence, ANR non thématiques, ANR Jeunes Chercheurs ...) permettent de répondre en grande partie à ces objectifs. On reste toutefois encore loin de pouvoir – comme dans les pays voisins – proposer une « enveloppe complète » à un candidat extérieur de stature internationale : poste pour le chef de projet, bourses doctorales et post-doctorales, moyens d'équipements, locaux C'est pourquoi un très fort engagement de la part des tutelles est nécessaire pour avoir une petite chance de réussir de telles opérations. Deux opérations nouvelles concernant directement le LCAR sont susceptibles de démarrer dans un délai court :

- Tout d'abord la succession de John Weiner devrait permettre d'attirer un jeune leader de classe internationale qui – tout en assurant une continuité sur les projets existants – pourrait ouvrir de nouveaux projets sur le thème de la manipulation d'atomes interagissant avec des nanostructures et de ses applications à l'information quantique (avec collaborations possibles avec le LPT).
- L'IRSAMC a lancé une réflexion sur son « Avenir », et en particulier sur le développement de nouveaux thèmes. Après présélection de cinq thèmes, c'est finalement celui de la « Physique et Chimie aux temps courts » qui est apparu comme le plus susceptible, de s'ancrer sur des forces expérimentales solides et un environnement théorique de premier plan à l'IRSAMC, et de couvrir un champ suffisamment large pour permettre le démarrage d'opérations réellement nouvelles. Un poste de professeur a été demandé par l'Université Paul Sabatier pour cela en 2006.

Nous pensons que ces deux opérations doivent pouvoir se mener sur une échelle d'un plan quadriennal.

A côté du souhait de pouvoir faire émerger des projets autour de nouveaux leaders, les grandes réformes structurelles menées au niveau du CNRS nous ont amenés à lancer la réflexion au LCAR sur la taille « idéale » d'un laboratoire ainsi que sur les possibilités d'évolution du LCAR qui doivent se situer assez naturellement au sein de l'IRSAMC. Plusieurs éléments sont à prendre en compte : mutualisation des moyens techniques (calcul, dispositifs expérimentaux), humains (d'encadrement de la recherche en particulier), Une rationalisation de ces moyens pousse à une augmentation de la taille moyenne des laboratoires. Simultanément cet objectif, en réduisant le nombre de laboratoires, « simplifie » le dispositif du point de vue de la Direction du CNRS. Il peut changer aussi notablement la nature des activités d'un directeur de laboratoire pouvant le conduire à déplacer nettement l'équilibre des temps consacrés à l'administration et à la recherche. Cette analyse succincte est en général valable. Dans le cas précis des laboratoires de l'IRSAMC avec des activités aussi différentes que des expérimentateurs et théoriciens (avec leurs modes de travail, leurs contraintes, leurs gouvernances très diverses), les gains espérés en termes de mutualisation sont très faibles. La cellule informatique fonctionne déjà au niveau de l'IRSAMC. Seule l'activité de type « Secrétariat de Direction » serait légèrement allégée (ou du moins changerait de nature). Il n'en reste pas moins que pour des questions de visibilité, en particulier au niveau local, un regroupement des laboratoires peut s'avérer important.

Au niveau du LCAR les regroupements pouvaient s'organiser, soit avec le LPST pour privilégier la mutualisation des moyens expérimentaux (autour des spectroscopies optiques), soit avec le LPQ pour renforcer la charnière « Chimie Physique », soit avec tout l'IRSAMC. Le rapprochement LCAR – LPST avait été fortement suggéré à ce dernier par la section 05 du Comité National au printemps 2004. Le LPST a d'abord envisagé très sérieusement pendant un semestre de participer au projet de création du LPCNO à l'INSA. Cette éventualité n'a finalement pas abouti et, à l'automne 2004, des discussions ont commencé entre le LCAR et le LPST pour envisager les modalités d'un possible rapprochement. L'avantage de la mutualisation des supports techniques était contrebalancé par le manque d'interactions scientifiques existantes. Pour cette dernière raison, le LPST a finalement décidé en mai 2005 de rejoindre le CEMES, mettant ainsi un terme à ces discussions.

Nous avons alors mis en place un groupe de travail (B. Girard, P. Labastie, D. Lemoine, M. Richard-Viard, C. Rizzo, M.F. Rolland, J. Vigué) pour envisager les possibilités d'élargissement du LCAR vers les autres laboratoires de l'IRSAMC (LPT, LPQ) et réfléchir à un type d'organisation que pourrait avoir un laboratoire commun. Ces laboratoires étant purement constitués de théoriciens, leur mode de fonctionnement est très nettement différent

de celui d'un laboratoire à dominante expérimentale comme le nôtre. En juillet, suite à une première réunion constructive du groupe de travail LCAR avec le Conseil Scientifique du LPQ, le Conseil de Laboratoire LCAR s'est prononcé favorablement pour un rapprochement LCAR – LPQ, alors qu'en parallèle une Assemblée Générale du LPQ marquait des réticences fortes. Il est prévu que les discussions approfondies reprennent avec comme objectif des propositions concrètes d'évolution pour le « mi-parcours ».

Le constat principal ressortant de ces réflexions est la sous criticité des activités expérimentales. Notre laboratoire a bien digéré sa première phase de croissance, la plupart des opérations lancées sont stabilisées. Il reste toutefois de taille modeste en comparaison avec les laboratoires de notre communauté. Il est important – indépendamment des regroupements de laboratoire – de relancer une nouvelle phase de renforcement des activités expérimentales. Les deux projets cités ci-dessus devraient nous permettre d'atteindre cet objectif.

2.1. Bilan scientifique

Les activités scientifiques du LCAR sont découpées en sept équipes de recherches à dominante expérimentale pour six d'entre elles et purement théorique pour la septième. Certaines équipes expérimentales ont développé plusieurs montages expérimentaux autonomes. Les évolutions prévues pour le début du prochain contrat sont le regroupement des deux équipes « Interaction ion-surface » et « Spectrométrie d'électrons dans les collisions » pour former une équipe « Interactions ions – matière » sur le thème des dommages induits par les radiations sur le matériel génétique.

Les projets présentés par les équipes de LCAR en réponse aux différents appels d'offre nationaux et européens ont reçu globalement un accueil très positif :

- Deux projets « ANR non thématique » viennent d'être retenus.
- En 2002, deux ACI jeune chercheur.
- En 2004, une ACI Nanosciences.
- En 2000-2006, deux projets CPER impliquent directement le laboratoire.
- En 2002-2003, deux contrats Région.
- Participations à cinq réseaux européens.

Nous présentons brièvement ci-dessous les éléments notables de chacune des équipes.

L'équipe « Structure, Dynamique et Thermodynamique des Agrégats » a connu des évolutions significatives : premières expériences de dynamique femtoseconde sur des agrégats, en collaboration étroite avec l'équipe « Femtosecondes », démarrage d'un nouveau projet d'envergure (retenu par l'ANR en 2005) sur l'étude thermodynamique de systèmes finis et plus particulièrement des propriétés de collage. Les premières études concernent un système homogène « modèle », le collage d'atomes de sodium sur des agrégats de sodium. L'étape suivante s'intéressera aux agrégats d'eau, avec le problème – central en physique de l'Atmosphère – du mécanisme de croissance des aérosols et de la chimie qu'ils peuvent abriter. Enfin, Pierre Labastie a transmis la responsabilité de l'équipe à Jean-Marc L'Hermite.

L'équipe « Optique pour les tests fondamentaux » regroupe deux projets expérimentaux distincts, mais présentant une forte cohérence : l'interférométrie atomique et la mesure de la Biréfringence Magnétique du Vide. L'expérience d'interférométrie atomique a connu des succès remarquables. L'extrême sensibilité et la très forte visibilité obtenue permettent maintenant d'entreprendre différentes mesures de précision. Les premières mesures ont concerné la polarisabilité électrique du lithium (précision 3 fois supérieure aux travaux antérieurs, très bon accord avec les calculs théoriques) et l'effet d'un gradient de champ magnétique. L'enjeu de la mesure de la Biréfringence Magnétique du Vide a considérablement évolué au cours de l'année écoulée. Il s'agit de confirmer (ou infirmer) les

résultats très spectaculaires annoncés récemment par l'expérience italienne concurrente PVLAS. L'effet observé, de quatre ordres de grandeur supérieur aux prédictions de l'électrodynamique quantique, pourrait révéler la création d'axions liés à l'énergie noire invoquée depuis peu par les cosmologistes. Ce projet est mené en collaboration avec l'équipe de G. Rikken du Laboratoire National de Champs Magnétiques Pulsés (LNCMP). Des bobines produisant un champ magnétique transverse ont été spécialement développées. Un champ de 13 T a été obtenu récemment (sur une longueur de 30 cm et un diamètre utile de 20 mm). Une cavité optique de finesse 50 000 a déjà été réalisée. Le projet entrera dans une phase « opérationnelle » en 2006 : le prototype (longueur et champ réduits) devrait déjà permettre de tester les résultats italiens. Des mesures de l'effet Kerr dans l'oxygène ont permis d'effectuer les premiers tests de sensibilité. En parallèle, la possibilité de mesurer cet effet dans les étoiles à neutrons doubles a été étudiée en collaboration avec G. Bignami (CESR).

L'équipe « Manipulation d'atomes avec des champs proches émis par des nanostructures » s'est engagée dans plusieurs projets expérimentaux ambitieux, ainsi que dans des études théoriques associées. Le premier projet expérimental concerne la gravure de monocouches auto-assemblées (SAM) par « stylo atomique » (jet d'atomes de césium). Les premiers résultats obtenus avec des masques matériels sont encourageants. L'objectif est ensuite de créer les masques par des réseaux lumineux piégeant les atomes. Le deuxième projet concerne l'étude des champs optiques issus de nanostructures avec en particulier les structures de type « tamis à photons » qui ont suscité un vif intérêt dans la communauté. Deux interprétations, de type plasmonique ou diffractif, coexistent et les expériences menées dans le groupe sont susceptibles de fournir des éléments permettant de trancher. Cette équipe est fortement impliquée dans la communauté internationale avec en particulier les réseaux européens (coordination de FastNet).

L'équipe « Spectroscopie moléculaire ultrarapide et Contrôle cohérent » a obtenu des résultats significatifs dans plusieurs fronts sur lesquels elle était engagée. Sur le plan instrumental, un façonneur d'impulsions « phase et amplitude », de résolution inégalée, a été construit. Il a permis de nombreuses mesures comme par exemple la mise au point d'une méthode de mesure « temps réel » de l'état quantique du système, ainsi que de celle du champ laser avec lequel il interagit. Les phénomènes de propagation d'impulsions ultracourtes au voisinage d'une résonance atomique produisent de fortes déformations de l'impulsion ou d'un train d'impulsions qui ont été compensées grâce au façonneur. En régime de champ fort, des transferts de population peuvent se produire entre une impulsion sonde faible et le milieu « habillé » par une impulsion pompe forte. Les études pompe-sonde moléculaires ont permis notamment de mettre en évidence un intéressant phénomène de cohérences rotationnelles dans l'azulène. Enfin, dans une collaboration avec K. Ohmori et C. Meier, des interférences transitoires ont été observées entre deux paquets d'onde nucléaires se croisant dans un puits de potentiel moléculaire.

L'équipe « Spectrométrie d'ions dans les collisions » (nouveau responsable : Patrick Moretto-Capelle) a poursuivi ses travaux sur les collisions d'ions légers faiblement chargés (H^+ , He^+ , He^{2+} , H_2^+ , H_3^+) avec des cibles moléculaires, dans un domaine d'énergie situé entre 1keV et 130keV. Ces mesures réalisées pour différents systèmes collisionnels en fonction de l'énergie de collisions montrent des variations très différentes suivant les processus mais aussi en fonction des différents systèmes collisionnels. Une nouvelle activité sur les molécules d'intérêts biologique a débuté. Ce thème de recherche s'inscrit dans le cadre général des « dommages induits par les radiations dans les bio-molécules » et traite de l'interaction d'un rayonnement ionisant à l'échelle des molécules biologiques telles que les constituants de l'ADN. Le but de cette thématique est de réaliser un pont entre les interactions à l'échelle moléculaire et la radiobiologie. La fragmentation induite par collision de petites

biomolécules, essentiellement des bases de l'ADN et de l'ARN, ainsi que l'émission d'électrons secondaires durant ces collisions seront caractérisées. En effet, ces électrons secondaires de basse énergie sont probablement responsables de dégâts supplémentaires dans l'ADN, par attachement dissociatif ou par ionisation suivie de fragmentation. Ces études seront menées conjointement avec l'équipe « Interactions ions – surface ». Une fusion des deux équipes est prévue au début 2007 pour former l'équipe « Collisions ions – matière ».

L'équipe « Interactions ion – surface » a poursuivi les études d'échanges de charges lors de collisions rasantes d'ions sur les surfaces d'halogénures d'alcalins et sur les surfaces métalliques nanostructurées. Les outils théoriques (code MARLOWE) utilisés pour simuler les expériences ont été validés grâce à une comparaison avec des calculs *ab initio*. Par ailleurs, une collaboration a démarré avec le groupe « Matériaux et procédés plasma » du Laboratoire de Génie Electrique de Toulouse » dans le but de caractériser des couches minces réalisées par dépôt plasma. L'évolution des thèmes abordés vers les collisions avec des biomolécules déposées conduira prochainement à un rapprochement avec l'équipe « Spectrométrie d'ions dans les collisions » comme indiqué plus haut.

Les activités sur le thème « Collisions froides électron – molécule à haute résolution avec des photoélectrons synchrotron » menées par Jean-Pierre Ziesel ont permis d'obtenir de nombreux résultats originaux. Des résonances géantes ont par exemple été observées dans les collisions e^- - CO₂. Cette activité va se terminer avec le départ de J.-P. Ziesel.

Le groupe « Théorie des processus dynamiques dans les systèmes moléculaires » aborde des problèmes très variés sur la dynamique d'atomes ou molécules en phase gazeuse ou sur des surfaces, en interaction ou non avec des photons ou une pointe STM. Les méthodes utilisées sont celles de la mécanique quantique ou mixtes quantique-classique. Les résultats sont remarquables. Plusieurs sujets de recherche ont été initiés dans cette période. En collaboration avec des groupes expérimentaux du LCAR, les études de la dynamique femtoseconde ont été étendues à des petits agrégats (avec les équipes agrégats et femto), et des études sur la dynamique entre atomes exotiques (avec C. Rizzo) ont donné des résultats très remarquables. N. Lorente a obtenu en septembre 2001 une ACI jeune chercheur pour trois ans. Elle porte sur l'étude théorique des transferts d'énergie et de charge entre particules et surfaces solides. L'objectif est de comprendre la manipulation d'objets de taille atomique sur des surfaces solides pour traiter les problèmes liés au développement de nanostructures ayant des propriétés électroniques, chimiques et structurales bien définies. Cette recherche se place dans le cadre général de la manipulation par STM. En collaboration avec le Fritz-Haber Institut de Berlin, des réactions chimiques induites sous un microscope à effet tunnel entre une molécule d'ammoniac et une surface de cuivre ont été réalisées et interprétées. Les résultats de cette collaboration internationale montrent que le microscope à effet tunnel permet un contrôle sélectif de la dynamique de la molécule conduisant soit à son déplacement sur la surface, soit à une évaporation. Parallèlement, des études de collision ion-surface métallique sont conduites en collaboration avec l'équipe expérimentale ion-surface du laboratoire. La responsabilité de l'équipe est maintenant confiée à Christoph Meier et Nicolas Lorente.

Une médaille de bronze CNRS a été attribuée à C. Meier en 2002 et à B. Chatel en 2005. Le prix Simone et Cino Del Duca a été attribué par l'Académie des Sciences à l'équipe « femtosecondes » en 2005. B. Chatel a par ailleurs reçu le prix Irène Joliot-Curie 2005.

2.2. Actions d'ouverture vers le grand public

Les chercheurs du laboratoire se sont fortement investis dans l'organisation de l'Année Mondiale de la Physique. Plusieurs d'entre eux sont membres fondateurs de l'association « Physique 2005 en Midi-Pyrénées ». En particulier, Cécile Robilliard en est la trésorière. Bruno Lepetit a été responsable d' « Objectif Physique » (semaine de la Physique à l'Université Paul Sabatier), Carlo Rizzo a organisé l'exposition « Voyage au Centre de la Physique ». Cécile Robilliard a organisé la semaine de la physique à Rodez. Arnaud Le Padellec a coordonné les journées portes-ouvertes de l'IRSAMC. De nombreuses expériences de démonstrations ont été réalisées par Béatrice Chatel et Cécile Robilliard. Bien d'autres ont également participé par des aides plus ponctuelles.

De ce fait, le budget de l'association a été entièrement géré par le laboratoire, entraînant un surcroît de travail au secrétariat et aussi des reliquats importants pour la fin 2005 (toutes les subventions ont été reçues en 2005 alors que les manifestations sont prévues jusqu'à l'été 2006). Des expositions ont été organisées tout au long de l'année dans les 8 départements de la Région, avec une forte participation de tous les personnels du laboratoire en particulier les ITA.

2.3. Animation de la communauté scientifique

Les personnels du laboratoire se sont fortement impliqués dans l'organisation de COLOQ'8 – Horizons de l'Optique en septembre 2003 (J. Vigué, F. Lozes (LAAS) responsables) qui a attiré plus de 300 participants. D'autres manifestations scientifiques ont aussi été organisées par le laboratoire.

- Ecole d'été "Coherent Control in atomic and Molecular systems", Cargèse, Octobre 2002 (B. Girard)
- Colloque "Quantum Vacuum and the search for New Forces", Les Houches juin 2005 (C. Rizzo, A. Lambrecht, D. Bakalov)
- Ecole Franco-Syrienne « Laser-matter interaction », Université d'El Baath, Homs, 15-20 novembre 2005 (M. Aziz Bouchène)

2.4. Ressources humaines

Créé en 1992 par fusion entre le Laboratoire de Collisions Atomiques de Toulouse et la Jeune Equipe « Dynamique des Edifices Atomiques », dans le cadre d'une opération de décentralisation menée en concertation entre le MENESR, le CNRS et l'Université Paul Sabatier. Le LCAR a évolué sous l'effet de mutations successives et de recrutements pour une large fraction d'extérieurs au laboratoire. Sur les 24 chercheurs et enseignants-chercheurs présents en octobre 2005, il faut noter que 4 chercheurs CNRS et 1 professeur sont arrivés par mutation alors que 8 chercheurs CNRS y ont été recrutés sur leur premier poste permanent. Sur ces 24 personnes, seulement 6 d'entre eux ont soutenu leur thèse à Toulouse.

L'évolution des effectifs est la suivante :

Année	Effectifs								Total
	Chercheurs	Enseignants Chercheurs	C + EC	ITA	IATOS	ITA + IATOS	Docto- rants	post- docs	
déc-91	5	6	11	2	3	5	1		17
déc-94	9	10	19	5	3	8	8	1	36
déc-97	7	12	19	6	5	11	9	2	41
déc-01	12	15	27	6	5	11	9	1	48
déc-03	12	13	25	7	5	12	10	5	52
mars-05	13	13	26	7	5	12	9	2	49
déc-05	11	13	24	8	5	13	8	3	48
déc-06	11	10	21	8	5	13	8	3	45

Ces effectifs incluent 2 à 3 IATOS affectés à l'IRSAMC, mais travaillant pour l'essentiel pour le LCAR (1 seulement fin 2005) et 1 professeur émérite depuis 2001.

Les 11 chercheurs présents au LCAR se répartissent en 1 DR et 10 CR, dépendant tous de la section 04 du Comité National. Les 13 enseignants-chercheurs se répartissent en 9 Pr (dont 1 émérite) et 4 MCF. Deux d'entre eux sont en 28^{ème} section du CNU et tous les autres en 30^{ème}.

Les derniers chercheurs arrivés sont D. Lemoine (CR1, mutation au 1^{er} mai 2003) et S. Zamith (CR2, recrutement au 1^{er} octobre 2004). Trois départs en retraite viennent de se produire en août 2005 (2 DR, 1 IR IATOS). Deux enseignants-chercheurs envisagent de faire valoir leurs droits à la retraite en 2006.

L'évolution de ces effectifs est liée à des mutations et recrutements « frais » du côté CNRS, à quelques créations de postes au début des années 1990, suivis de redéploiements internes à la 30^{ème} section (fin des années 1990) pour le côté enseignants-chercheurs. Deux postes d'enseignants-chercheurs ont été récemment perdus par redéploiement (en 2003 vers le LNCMP, en 2005 en dehors de l'UFR). Le dernier poste de maître de conférences ouvert au concours pour le laboratoire date de 2000. On peut espérer que cette hémorragie va s'arrêter. En effet, pour le printemps 2006, deux publications de postes susceptibles d'être vacants ont été retenues par l'Université (1 Pr 30 « nanophysique » et 1 MCF 30 Atomes et Molécules). En outre, un poste IRSAMC Pr 30-31 « Physique et Chimie aux Temps Courts – Dynamique » pouvant concerner directement le LCAR a été demandé par l'Université dans le cadre de la campagne de création de postes exceptionnels.

La répartition des chercheurs CNRS fait apparaître un fort déséquilibre entre DR (1) et CR (10). Cela s'explique d'une part par plusieurs mutations récentes de chargés de recherche, et d'autre part par des recrutements réguliers démontrant la capacité du laboratoire à attirer des candidats de grande qualité sur des projets dynamiques. La « pression » au niveau du passage DR augmente fortement, et ce d'autant plus que la maturité scientifique et la reconnaissance nationale et internationale, ainsi que les responsabilités prises par certains les rendent tout à fait aptes à passer rapidement Directeur de Recherches. Il faut espérer que cette situation va s'améliorer rapidement.

Du côté des ITA, le poste IR libéré a été publié au niveau Ingénieur d'études, spécialité lasers. Cet ingénieur aura pour mission de gérer le parc laser et particulièrement les chaînes laser femtosecondes. Un concours interne de Technicien a de plus été obtenu. Il a permis la promotion de D. Castex (Atelier de mécanique). Le CNRS a enfin ouvert un poste d'Ingénieur d'études « instrumentation » en NOEMI qui devrait finalement être pourvu par détachement. R. Lagarrigue (T informatique), absent 6 mois pour raisons personnelles, devrait revenir prochainement.

Plusieurs chercheurs ont changé d'équipe. Ainsi, A. Le Padellec a rejoint l'équipe « Spectrométrie d'ions dans les collisions » à l'automne 2004 et M. A. Bouchène a rejoint l'équipe « Théorie » en septembre 2005.

C. Meier et N. Lorente ont pris conjointement la responsabilité de l'équipe « Théorie » en octobre 2003. Il en est de même de P. Moretto-Capelle en janvier 2004 pour l'équipe « Spectrométrie d'ions dans les collisions », et de J.-M. L'Hermite pour l'équipe « Agrégats » en janvier 2005.

Le laboratoire bénéficie d'un flux de doctorants régulier mais à une valeur faible (2,5/an). En compensation, la très forte majorité bénéficie de bourse du Ministère et le niveau est de qualité si on en croit leur devenir. Le nombre de post-doctorants ou ATER est de l'ordre de 3 à 4 (18 mois ATER/an et 31 mois post-doc/an). Il est souhaitable d'augmenter ces effectifs dans l'avenir.

Sur les 18 docteurs sortis du laboratoire avant 2003, quatre ont obtenu un poste de chargé de recherche au CNRS et cinq de maître de conférence dans des universités, quatre sont ingénieurs dans l'industrie, un est enseignant en classe préparatoire, et 3 sont retournés dans leur pays d'origine.

2.5. Budget

Sur le plan financier, le soutien de base « par chercheur permanent » a connu une baisse considérable dans les années qui ont suivi la création du laboratoire. La raison essentielle provient de l'augmentation des effectifs (un doublement) qui n'a été accompagnée que d'un effort très modeste de la part du ministère, significatif mais encore insuffisant de la part du CNRS :

	Crédits (soutien de base, en k€ HT)					Ratio
	C + EC	CNRS	Ministère	Total		(crédit/(C+EC))
janv-92	11		136,3	136,3		12,39
déc-94	19		111,3	111,3		5,86
déc-97	19	61,0	60,5	121,5		6,39
déc-01	27	88,4	67,0	155,5		5,76
déc-03	25	73,7	67,5	141,2		5,65
mars-05	26	100,0	67,5	167,5		6,44

Toutes les expériences du laboratoire sont des montages complexes, entièrement construits par les chercheurs avec l'aide des équipes techniques. Les effectifs de celles-ci sont insuffisants, de même que les financements alloués. Si de nouveaux projets ne peuvent démarrer qu'avec l'aide d'opérations spécifiques, l'exploitation des montages existants nécessite des coûts de maintenance et renouvellement qu'il est difficile de prendre en charge sur le seul soutien de base. Il est vital que ces soutiens de base remontent à des valeurs significativement plus élevées.

Soutien de base (HT) après prélèvements BQR				
Origine	2002	2003	2004	2005
CNRS	88400	73694	88000	100000
Ministère	67049	67517	67517	67517
Total	155449	141211	155517	167517

Le soutien de base est ventilé en 4 postes d'importance comparable. Les deux premiers sont distribués aux équipes avec d'une part un forfait par chercheur pour les missions, la papeterie et le téléphone et d'autre part un forfait de fonctionnement par projet (avec une petite modulation sous forme de coefficient). Les équipes ayant reçu un important financement ont par ailleurs parfois renoncé à « leur part ». Le troisième poste sert au fonctionnement des services communs et des séminaires. Enfin, le dernier poste est utilisé

pour des « Actions spécifiques internes ». Elles permettent de faire évoluer des montages expérimentaux, de renouveler des pompes à vide, d'acheter des équipements pour les services, ou d'apporter un complément à un nouveau projet lancé dans le cadre de programmes. Les détails de cette répartition figurent dans l'annexe budgétaire.

Les contrats européens et actions spécifiques variées ont permis d'obtenir annuellement entre 200 et 475 k€ d'équipement et environ 75 k€ de salaires. Les Contrats de plan Etat-Région ont été une source importante de financements. Les incertitudes planant sur le prochain plan sont une importante source d'inquiétude.

Crédits spécifiques (€ HT)

Origine	2002		2003		2004		2005		Moyenne	
	Fct/Eq	Salaire	Fct/Eq	Salaire	Fct/Eq	Salaire	Fct/Eq	Salaire	Fct/Eq	Salaire
Moyens spécifiques CNRS	163 110		73 781		51 530	3 200	72 803			
Reversement BQR et ressources supplémentaires provenant de l'établissement	11 417		10 956		30 052		16 972			
Collectivités territoriales	60 194		28 288		3 186					
Contrat de Plan Etat-Région	91 469						239 500			
Communauté européenne	76 617	23 466	108 393	125 095	94 252	110 301	27 580	6 344		
Fonds National pour la Science					51 170					
Fonds pour la Recherche et la Technologie										
Contrat de recherche Industriel : Amplitude							10 600			
Autre contrat (BNM)					6 773		8 278			
Autre contrat (prix Del Duca de l'Académie des Sciences)							83 612	64 000		
Total	402 807	23 466	221 418	125 095	236 963	113 501	459 345	70 344	330 133	83 102

2.6. Locaux

Le LCAR occupe une grande partie des trois premiers niveaux du bâtiment 3R1b4 (sous-sol, RdC, 1^{er} étage). Le RDC est partagé entre le LCAR et les espaces réservés aux services communs de l'IRSAMC (bibliothèque, atelier de mécanique, atelier d'électronique). Un projet de rénovation d'un espace d'environ 400 m² au sous-sol pour créer un véritable « centre laser femtoseconde » autour des nouvelles sources est en cours de discussion. Pour cela, l'enveloppe de 230 k€ obtenue dans le cadre du CPER « Spectroscopies Optiques Ultimes » doit être complétée. Dans l'état actuel des choses, la nécessité d'une mise en conformité préalable du bâtiment risque de retarder le démarrage du projet de plusieurs années.

2.7. Le LCAR et l'IRSAMC

L'IRSAMC a été reconnu par le Ministère comme Pluriformation en 1994, puis par le CNRS sous forme de Fédération de recherche (« de Physique et Chimie fondamentale ») début 2003. Il est actuellement composé de 4 UMR (avec effectifs de permanents):

- Le LCAR : 11 C + 14 EC + 8 ITA + 4 IATOS
- Le LPQ (Laboratoire de Physique Quantique, UMR 5626) : 14 C + 16 EC + 2 ITA + 2.5 IATOS
- Le LPT (Laboratoire de physique Théorique, UMR 5152) : 6 C + 10 EC + 1 ITA
- Le LPST (Laboratoire de Physique des Solides de Toulouse, UMR 5477) : 2 C + 9 EC + 5 IATOS + 2 ITA

soit un total pour l'IRSAMC : 33 C + 49 EC + 12 ITA + 12.5 IATOS

L'IRSAMC gère un certain nombre de services communs : ateliers de mécanique et d'électronique, réseau informatique, bibliothèque, séminaire. Actuellement des collaborations scientifiques donnant lieu à publication existent entre le LCAR et le LPQ, le LCAR et LPT, le LPT et le LPQ. Au-delà de ces collaborations, de nombreuses discussions informelles donnent une réalité à l'Institut. Par contre, les statuts de l'Institut spécifient très clairement que chaque laboratoire reste autonome dans la définition de sa politique scientifique. Les collaborations explicites entre équipes du LCAR et équipes d'autres laboratoires de l'IRSAMC sont les suivantes :

- **Spectroscopie, dynamique et Thermodynamique d'agrégats** : équipe agrégats (LCAR) – F. Spiegelmann, F. Calvo, G. Durand, M.-C. Heitz (LPQ)
- **Etude théorique de Dynamique ultrarapide de systèmes moléculaires** : Equipe « théorie » (LCAR) – M.-C. Heitz, F. Spiegelmann (LPQ)
- **Dynamique de fragmentation de complexes de van der Waals** : Equipe « théorie » (LCAR) – N. Halberstadt (LPQ)
- **Surfaces de potentiel électronique** : Equipe « théorie » (LCAR) – C. Teichteil (LPQ)
- **Dynamique d'agrégats en champ laser intense** : équipe « femtosecondes » du LCAR – Dynamique des agrégats (E. Surraud (LPT))
- **Détermination de spectres et de résonances par les méthodes de la résolvente** (B. Lepetit (LCAR) – X. Gadea (LPQ)).

Le LCAR est directement concerné par le projet de renforcement de la thématique « physique et chimie aux temps courts » mis en avant par la cellule de réflexion sur l'avenir de l'IRSAMC.

2.8. Le LCAR et ses autres collaborations locales

Projet de mesure de **biréfringence magnétique du vide** (BMV, C. Rizzo). L'enjeu est de vérifier une prédiction de l'électrodynamique quantique. Des résultats préliminaires obtenus récemment par une équipe italienne pourraient être expliqués par l'existence de la matière sombre prédite par les cosmologistes. L'expérience menée en collaboration avec G. Rikken (LNCMP) a les capacités d'infirmer ou de confirmer cette découverte qui aurait un retentissement important. Des travaux menés en collaboration avec G. Bignami (CESR) étudient la possibilité d'observation de ces effets dans les étoiles à neutrons.

Le **contrôle cohérent à l'échelle femtoseconde** a été développé en parallèle au LNMO (X. Marie, T. Amand) et au LCAR (B. Girard). Cette collaboration, initiée en 1992 dans le cadre d'une action conjointe soutenue par le Ministère, a permis le développement des études aux temps courts à Toulouse. De nombreux mécanismes de contrôle cohérent ont été tout d'abord identifiés et testés dans des atomes ou molécules au LCAR, puis appliqués à des systèmes à semi-conducteurs au LNMO. Cette collaboration a été soutenue par des PPF successifs, puis par le CPER « Spectroscopies Optiques Ultimes ».

Forte collaboration N. Lorente (LCAR) – H. Tang (CEMES) sur la **simulation d'images STM, AFM et manipulation de nano-objets** (ACI jeunes chercheurs 2001-2004).

Collaboration J. Weiner (LCAR) - C. Girard (CEMES) sur l'étude théorique d'images produites en champ proche par des nanostructures.

Le LMTG (SDU) s'est récemment équipé d'un laser femtoseconde de puissance permettant l'ablation de matériaux variés, pour la géodatation et l'analyse chimique. Celui-ci est couplé à un spectromètre de masse de haute résolution via une torche à plasma (IPCMS). La collaboration avec l'équipe « femtoseconde » du LCAR (B. Chatel) porte sur l'optimisation du processus (forme et nombre d'impulsions) afin de réduire le fractionnement chimique.

Une collaboration a été initiée en 2004 (BQR interdisciplinaire) entre B. Chatel (équipe « femtoseconde » du LCAR) et L. Salomé (IPBS (SDV)) sur des problèmes **d'imagerie haute résolution de nanoparticules** dans le but d'observer les mouvements de cellules biologiques.

2.9. Le LCAR et ses collaborations nationales et internationales

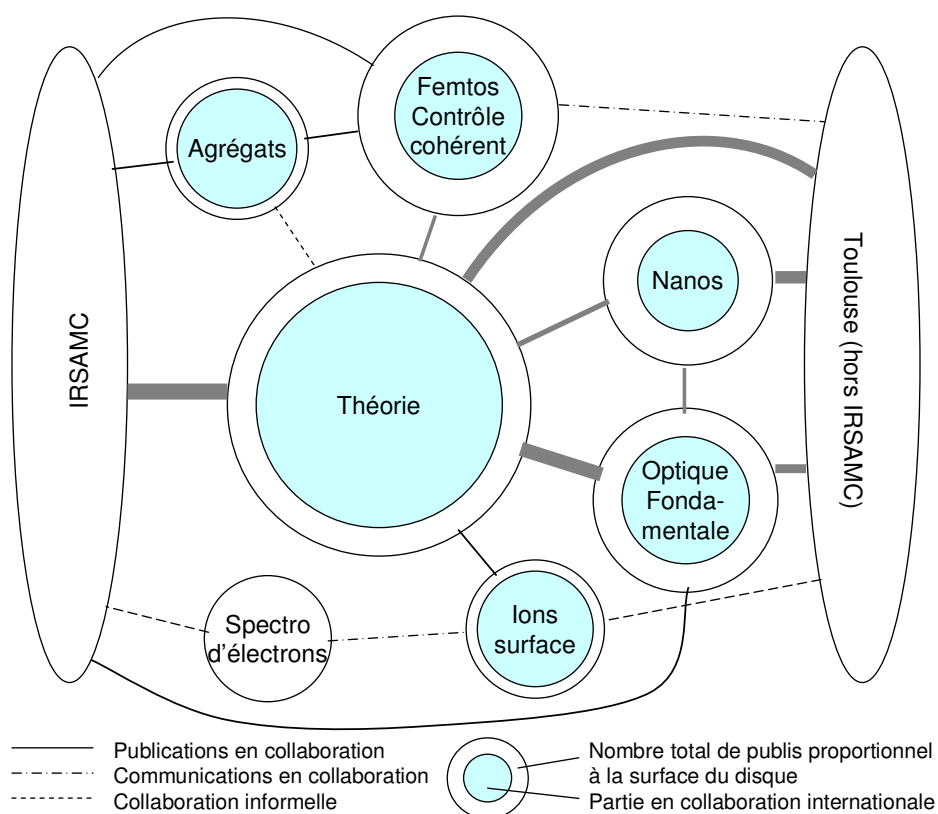
Les très nombreuses collaborations sont citées dans la partie consacrée à chaque équipe et sont reprises au chapitre 12 p. 207.

2.10 Les collaborations entre équipes du LCAR et avec leur environnement

Illustration basée sur les publications (parues et soumises) dans des revues internationales à comité de lecture. Le diagramme recense en outre les communications à conférences et collaborations informelles.

Publications en collaborations

	agrégats	opti_fond	nanos	femtos	spectro_e	ions_surf	theorie
agrégats	14	0	0	1	0	0	0
opti_fond	0	22	2	0	0	0	8
nanos	0	2	17	0	0	0	3
femtos	1	0	0	26	0	0	2
spectro_e	0	0	0	0	13	0	0
ions_surf	0	0	0	0	0	11	1
theorie	0	8	3	2	0	1	63
IRSAMC	1	1	0	1	0	0	9
Toulouse	0	6	7	0	0	0	6
France	2	1	4	3	2	0	2
International	10	11	6	11	0	9	41



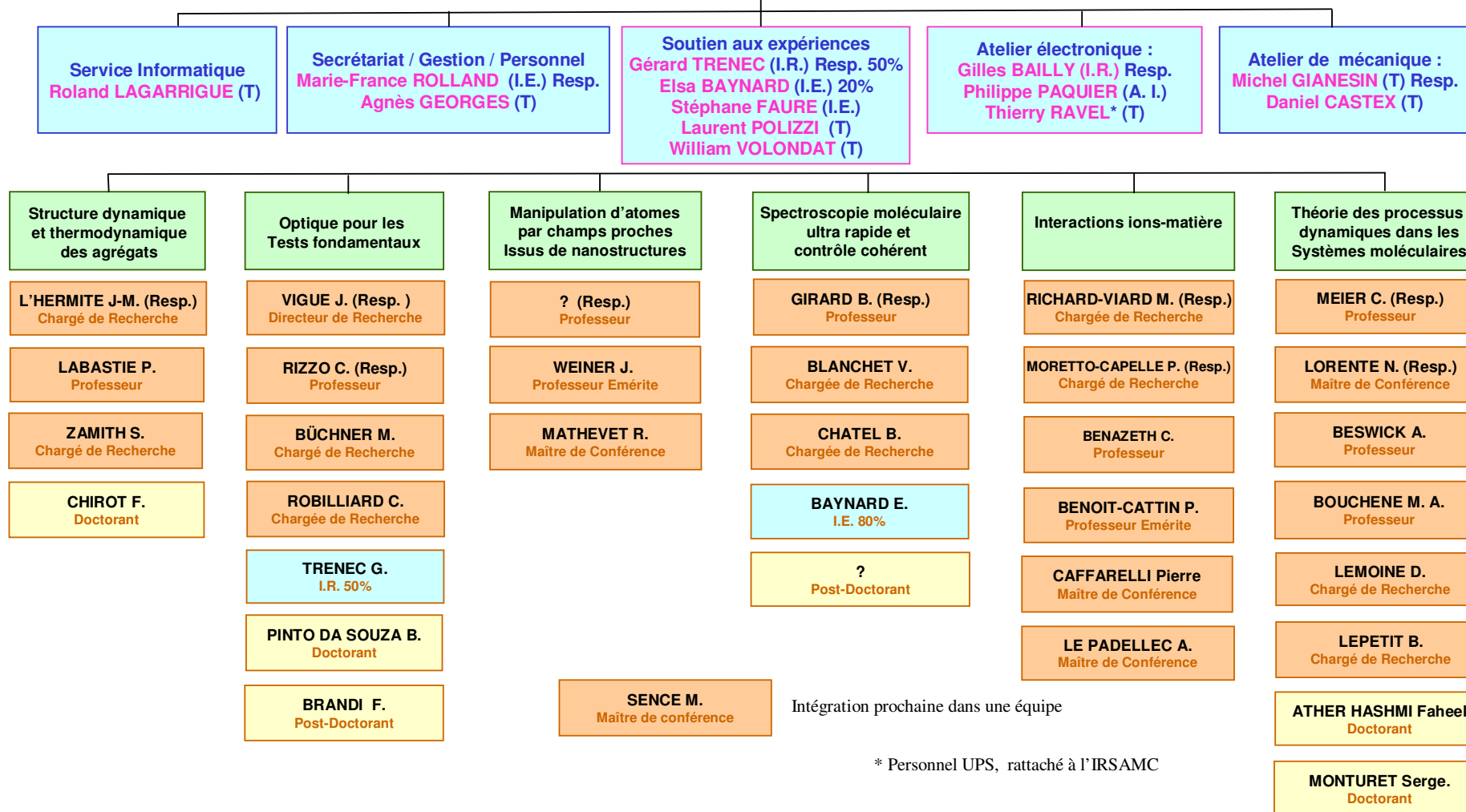
*Les surfaces des disques sont proportionnelles au nombre total de publications
 La partie bleue correspond aux publications impliquant une collaboration internationale
 L'épaisseur des traits est proportionnelle au nombre de publications communes*

Laboratoire Collisions Agrégats Réactivités – UMR 5589 CNRS

1er Janvier 2007

Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité

Directeur : Bertrand GIRARD
 Adjointe au directeur : Martine RICHARD-VIARD
 11 chercheurs / 14 (dont 2 émérites) enseignant-chercheurs
 8 ITA +4 (+1 Irsamc) IATOS



* Personnel UPS, rattaché à l'IRSAMC

3. Structure, dynamique et thermodynamique des agrégats

3.1. Composition de l'équipe

Responsables :

Pierre Labastie jusqu'au 01/2005
Jean-Marc L'Hermite depuis le 02/2005

Permanents :

Arnaud Le Padellec, Maître de conférence, jusqu'au 31/07/2004
Sébastien Zamith, CR2, depuis le 01/10/2004
Pierre Labastie, Professeur
Jean-Marc L'Hermite, Chargé de recherche

Doctorant :

M./Mme	Prénom	Nom	Financement	Arrivée	Départ
M.	Fabien	Chiot	Bourse ministère, moniteur	01/09/04	

Visiteur :

M./Mme	Prénom	Nom	Université	Financement	Arrivée	Départ
M	Martin	Schmidt	Paris XI, LAC	LCAR	21/06/2004	25/06/2004

Stagiaires (maîtrise, magistère, DEA, Ecoles, autres)

M./Mme	Prénom	Nom	Université/Ecole	Niveau	Arrivée	Départ
M	Cyril	Jaudet	Toulouse	L3	05/2004	07/2004
M	Nicolas	Renaud	Toulouse	L3	05/2004	07/2004
Melle	Marie-Laure	Christiaens	Toulouse	M1	05/2004	07/2004
M	Mounir	El Beiyad	Cachan	Magistère	06/2004	07/2004
M	Fabien	Chiot	Bordeaux	DEA	04/2004	07/2004
M	Florent	Malavelle	Toulouse	M1	05/2005	07/2005
M	Nicolas	Mercier	Orsay	L3	06/2005	07/2005

3.2. Compte-rendu de l'activité scientifique

Depuis sa création jusqu'au début de la période considérée ici, l'équipe « agrégats » du LCAR s'était consacrée à l'étude d'agrégats mixtes de métaux halogénés, par des techniques de spectroscopie laser et de spectrométrie de masse. Ce volet de son activité s'est achevé (peut-être provisoirement) par une étude de la dynamique à l'échelle femtoseconde d'un petit agrégat de fluorure de sodium, Na_3F , réalisée en collaboration avec l'équipe *Spectroscopie moléculaire ultrarapide et contrôle cohérent* et le soutien théorique, notamment, de M.C. Heitz (LPQ/IRSAMC). Nous avons montré que l'excitation électronique de cet agrégat par une impulsion ultra-brève de longueur d'onde bien choisie induisait une oscillation entre deux géométries se traduisant par une variation périodique du signal de photoionisation détecté par une seconde impulsion ultra-brève.

Après cette fructueuse collaboration, nous avons décidé de nous orienter vers un sujet d'apparence simple mais qui n'avait jamais été abordé expérimentalement à l'échelle des agrégats : la nucléation. Notre but est de caractériser les étapes successives de la construction d'un agrégat, depuis le dimère jusqu'à un objet d'une ou plusieurs centaines d'atomes. Nous avons pour cela conçu une nouvelle expérience afin de mesurer les sections efficaces de collage d'un atome sur un agrégat en fonction de plusieurs paramètres : la taille de l'agrégat, sa température et l'énergie de collision. Les agrégats produits seront analysés évidemment en taille mais aussi en température, par des mesures de taux de dissociation. Nous envisageons également de caractériser la phase thermodynamique (solide ou liquide) des réactants et des produits. Ce dispositif expérimental original est aujourd'hui en phase finale de mise au point. Il est d'ores et déjà suffisamment performant pour envisager les premières expériences de collage.

Les premières expériences seront consacrées à la nucléation d'agrégats de sodium, système modèle bien connu, aussi bien expérimentalement que théoriquement. Les mesures viseront d'abord à caractériser l'évolution de la section efficace de collage avec la taille. Nos calculs préliminaires prédisent d'une part des variations fines d'une taille à l'autre (dues à des effets de remplissage de couches électroniques, comme pour le potentiel d'ionisation et l'énergie de dissociation), d'autre part une évolution moyenne en fonction de la taille en $N^{1/2}$, différente de celle généralement supposée, proportionnelle à la surface de l'agrégat, en $N^{2/3}$. Nous mesurerons également les taux de dissociation des produits formés, reliés à leur température.

Ces résultats seront analysés à plusieurs niveaux : premièrement, dans le cadre des théories statistiques microscopiques qui décrivent la dissociation des agrégats (de type RRKM, PST,...), phénomène intimement lié au processus de collage dans l'hypothèse de microréversibilité ; deuxièmement, dans le cadre des modèles classiques de nucléation, de nature plus macroscopique, qui décrivent la formation de particules à partir d'un gaz. Ces derniers modèles, destinés à prédire notamment les taux de nucléation (avec un succès mitigé sur le plan quantitatif...), sont fondés sur la thermodynamique classique et utilisent des notions macroscopiques telles que la tension de surface. A partir de ces deux approches, nous tenterons de jeter un pont, comme souvent en physique des agrégats, entre les aspects microscopiques et macroscopiques de la nucléation. Il nous sera possible, à titre d'exemple, de mesurer directement un paramètre-clé de tous les modèles classiques de nucléation, la « taille critique », pour laquelle le taux de collage égale le taux d'évaporation. Cette taille critique N_c , bien qu'invoquée dans un modèle macroscopique, se situerait paradoxalement souvent dans le domaine microscopique, échelle à laquelle la théorie n'est pas valide ! Enfin, nous tenterons (la technique de mesure reste à valider expérimentalement) de déterminer la phase thermodynamique des agrégats incidents et produits par des mesures conjointes de leurs taux de dissociation. Il serait possible, selon des calculs préliminaires, d'observer des

phénomènes originaux tels la formation d'un agrégat solide après collage d'un atome sur un agrégat liquide.

Après le système modèle qu'est le sodium, nous passerons à l'étude, plus délicate mais d'une portée pratique plus évidente, de la nucléation de l'eau. Par les méthodes validées sur le sodium, nous mesurerons les sections efficaces de collage de molécules d'eau sur des agrégats d'eau pure ou hétérogènes. Nous avons décidé d'étudier ce système en raison de son intérêt en physique atmosphérique : la formation des nuages est évidemment conditionnée par le taux de nucléation de l'eau. Ce sujet jouit d'une recrudescence d'intérêt depuis quelques années, surtout en ce qui concerne les cirrus stratosphériques polaires (dénommés *PSC* pour *Polar Stratospheric Clouds*), en raison de leur impact sur le climat global. Or, le phénomène de nucléation de l'eau dans les nuages est très mal décrit, surtout dans son stade initial, lorsque les particules sont encore microscopiques. Il en résulte des différences par de nombreux ordres de grandeur entre mesures et prédictions, concernant les taux de nucléation par exemple. Les acides sulfuriques et nitriques semblent jouer un rôle important dans la formation et la composition des particules d'eau constituant les *PSC*. C'est pourquoi nous étudierons les agrégats non seulement purs mais aussi de type $(\text{H}_2\text{O})_n(\text{HNO}_3)_p$ et $(\text{H}_2\text{O})_n(\text{H}_2\text{SO}_4)_q$.

Parallèlement à ces travaux essentiellement expérimentaux, P. Labastie a abordé depuis deux ans un problème purement théorique. Il s'agit de caractériser la topographie des surfaces de potentiel des agrégats en utilisant comme variables de calcul les distances interatomiques plutôt que les coordonnées cartésiennes habituelles. On espère ainsi une vision différente du « paysage » énergétique des surfaces de potentiel. En particulier, on a obtenu une explication qualitative de la forme de la courbe donnant l'entropie en fonction de l'énergie pour des petits agrégats, qui pourrait expliquer certains aspects de la transition solide—liquide dans les agrégats.

Nous allons détailler dans la suite en quatre volets l'activité de l'équipe : les expériences aujourd'hui achevées de dynamique femtoseconde, les expériences en cours de collage, le projet d'étude de nucléation de l'eau, et l'étude théorique des transitions de phase dans les agrégats.

3.2.1. Dynamique femtoseconde de l'agrégat Na_3F

*Ce travail a été fait en collaboration avec l'équipe « femtoseconde » du LCAR
publication n°3*

Les expériences de type pompe-sonde utilisant des impulsions laser ultra-brèves, appliquées à des systèmes moléculaires parfois assez complexes, sont aujourd'hui monnaie courante. Elles servent à caractériser la dynamique de ces systèmes à l'échelle temporelle de la vibration moléculaire, et parfois même à contrôler cette dynamique. Cependant, sauf dans le cas de systèmes particulièrement simples (atomes ou molécules diatomiques), l'information recueillie se résume en général au taux de décroissance (ou de croissance) d'un phénomène induit par l'impulsion « pompe » : création d'ions (ou d'électrons), dissociation... Dans nos expériences sur l'agrégat Na_3F , nous avons observé, outre une décroissance, des oscillations temporelles qui sont une signature de la dynamique vibrationnelle du système excité. L'interprétation du signal pompe-sonde a nécessité une étude de l'agrégat Na_3F par spectroscopie de photodépopulation « traditionnelle ». La simulation par propagation de paquets d'onde, réalisée par M.C. Heitz (Laboratoire de Physique Quantique, UMR 5626, Toulouse), a mis en évidence l'origine des oscillations observées : elles résultent du mouvement quasi-périodique, induit par l'impulsion pompe, de l'atome de fluor, mouvement qui module le potentiel d'ionisation du système et donc le signal d'ions détectés.

3.2.1.1. Principe de l'expérience pompe-sonde

Les agrégats Na_3F sont produits par notre source à vaporisation laser et triés en masse par temps de vol. Les impulsions laser ultra-brèves, accordables sur une petite plage spectrale, sont délivrées par les deux NOPA (Non Collinear Optical Parametric Amplifiers) de l'équipe « femtoseconde ». Bien que sa mise en œuvre soit très délicate, le principe de l'expérience est extrêmement simple : les faisceaux des deux impulsions femtoseconde sont confondus et focalisés sur la zone d'ionisation du spectromètre de masse et le signal d'ions produits à la masse de Na_3F est enregistré en fonction du décalage temporel entre les impulsions pompe et sonde.

3.2.1.2. Spectroscopie de l'agrégat Na_3F

Les deux isomères les plus stables de Na_3F (voir *Figure 1*) ont quasiment la même énergie ; l'un est plan, de symétrie C_{2v} (isomère 1 dans la suite), l'autre a une forme de pyramide, de symétrie C_{3v} (isomère 2 dans la suite). Nous avons mesuré le potentiel d'ionisation par spectroscopie d'ionisation à un photon, et déterminé les bandes d'absorption par spectroscopie de photodépopulation. Les spectres obtenus sont présentés sur la *Figure 2*. Il apparaît clairement, par comparaison avec un spectre d'absorption théorique calculé par G.Durand (LPQ, UMR 5626, Toulouse), que c'est l'isomère 1 que nous excitons.

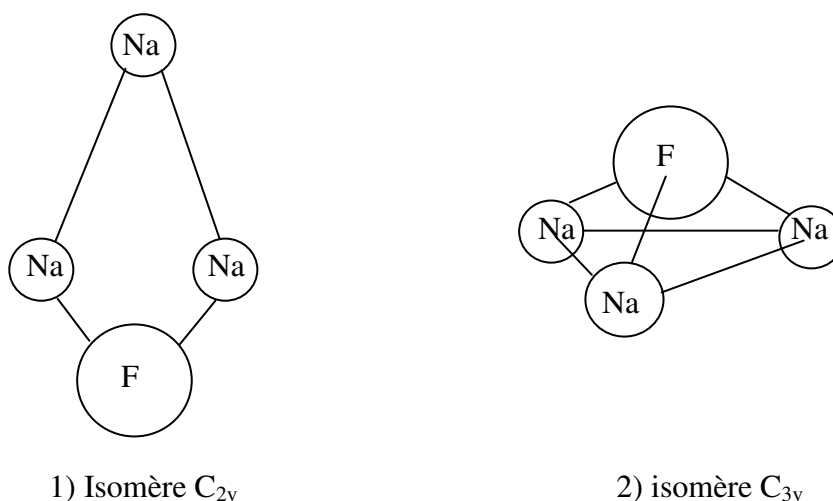


Figure 1 : Les deux isomères les plus bas de Na_3F . Le potentiel d'ionisation vertical de l'isomère 1 est 4.95 eV, celui de l'isomère 2 est 4.44 eV.

3.2.1.3. Expérience pompe-sonde femtoseconde

Les expériences pompe-sonde ont été menées avec une impulsion pompe à 510 nm (2.43 eV) et une impulsion sonde à 600 nm (2.05 eV). L'impulsion pompe excite l'isomère 1 de Na_3F dans l'état 1^1B_1 , responsable de la bande d'absorption centrée à 2.5 eV (voir *Figure 2*), tandis que l'impulsion sonde l'ionise à partir de cet état excité, après évolution du système. La somme des énergies des impulsions pompe et sonde (2.43+2.05=4.48 eV) est choisie au seuil, c'est-à-dire qu'elle permet d'ioniser certaines géométries et pas d'autres (par exemple, on ionise l'isomère 2 mais pas le 1) ; c'est cette caractéristique, essentielle, qui transfère l'information de mouvement en variation du signal d'ions. Le signal d'ions détectés en fonction du décalage temporel entre pompe et sonde est représenté sur la *Figure 3* : le signal oscille avec une période de 390 ± 10 fs, et décline avec un temps $\tau = 1275 \pm 75$ fs.

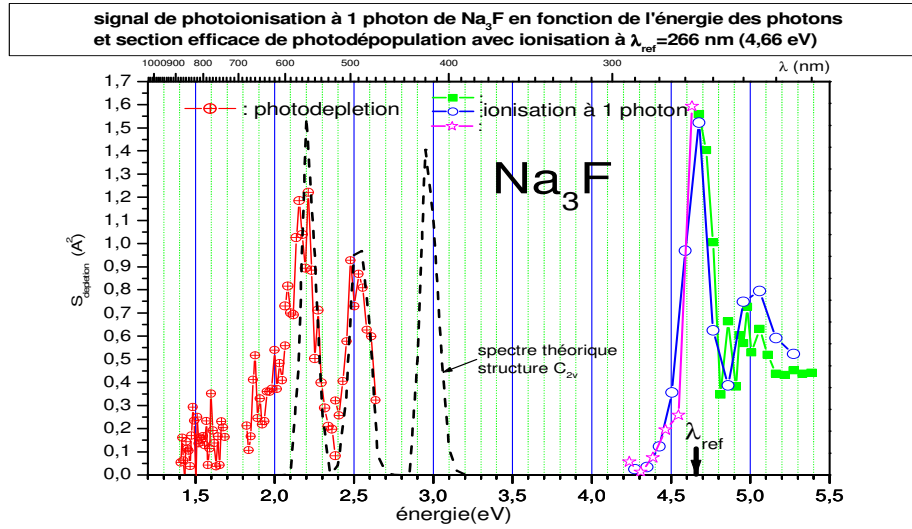


Figure 2 : Spectres d'ionisation et de photodépopulation de Na_3F . Le spectre théorique de l'isomère 1, représenté en pointillé, s'accorde bien avec l'observation.

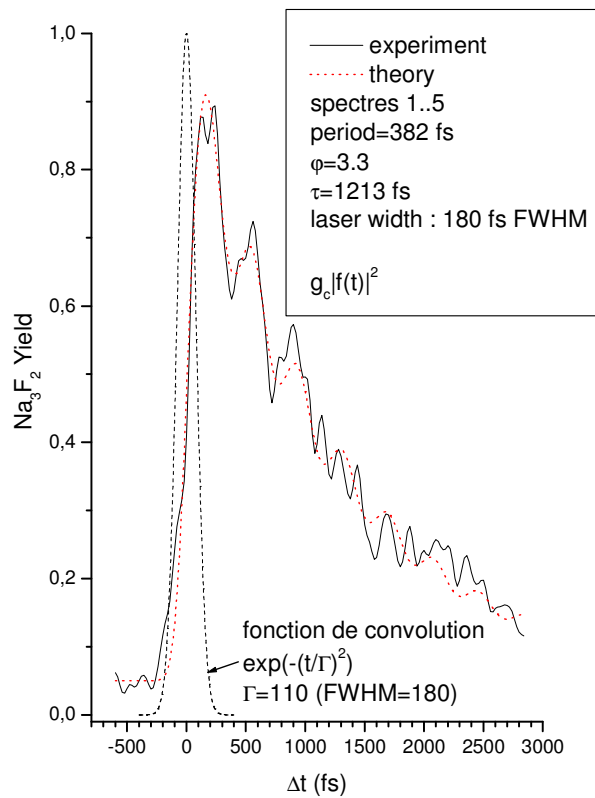


Figure 3 : Signal d'ions Na_3F obtenus en fonction du délai pompe-sonde Δt . Le signal expérimental est en trait plein. Il résulte de la moyenne de 5 spectres enregistrés dans les mêmes conditions. Le signal théorique est en pointillé. La « fonction de convolution », également en pointillé, est la fonction de corrélation croisée des impulsions pompe et sonde ; elle représente la résolution temporelle de l'expérience.

Les simulations numériques de M.C. Heitz¹ ont permis de comprendre l'origine de ce comportement. Examinons chronologiquement ce qui se passe. A $\Delta t=0$, l'agrégat est dans l'état électronique fondamental, dans la géométrie de l'isomère 1. L'impulsion pompe l'excite dans l'état 1^1B_1 . Il ne peut à ce stade être ionisé par l'impulsion sonde puisque le PI vertical de l'isomère 1 excède la somme des énergies des deux impulsions. Cependant, la géométrie d'équilibre de l'état excité est différente de celle de l'état fondamental, l'atome de fluor y est plus proche des atomes de sodium. Le système commence donc à évoluer vers cette géométrie en rapprochant l'atome de fluor du triangle formé par les 3 atomes de sodium. Lorsque le fluor passe entre les deux sodium les plus proches, les calculs montrent que le PI est alors suffisamment bas pour que l'impulsion sonde puisse ioniser le système : on détecte donc des ions Na_3F^+ . Puis le fluor continue son mouvement vers le centre du triangle de sodium, où il ne peut à nouveau plus être ionisé. Repoussé par le sodium qui se trouve en face de lui, il rebrousse chemin pour atteindre à nouveau la géométrie « ionisable », et ce mouvement se répète. On a donc une oscillation entre deux isomères dont l'un peut être ionisé et l'autre pas. C'est ce mouvement qui est responsable de la variation d'amplitude du signal d'ions détectés avec une période de 390 fs. Ce mouvement s'amortit au cours du temps par IVR (Internal Vibrational Relaxation): à chaque aller-retour, il y a un transfert d'énergie cinétique entre ce mode de vibration et d'autres modes de vibration, notamment symétriques et antisymétriques du triangle Na_3 . Au bout d'un certain temps, le système est piégé dans une géométrie non ionisable dans laquelle le fluor est plus ou moins au centre du triangle de sodium. D'autre part, l'énergie disponible est suffisante pour que le système se dissocie par éjection d'un atome de sodium. Ce sont donc à la fois le piégeage dans un état noir et la dissociation qui sont responsables du déclin du signal d'ions.

3.2.2. Expérience de collage appliquée au sodium

Des expériences de fragmentations sont depuis longtemps menées sur les agrégats. Récemment, on a utilisé les variations du taux de dissociation avec la température des agrégats pour réaliser des expériences de nanocalorimétrie (H.Haberland à Freiburg²). Ces expériences, encore en cours de développement, permettent de sonder, à un niveau fondamental, les propriétés thermodynamiques des systèmes finis. Un résultat remarquable a été la démonstration de capacités calorifiques négatives au voisinage de la transition solide-liquide dans les petits systèmes. Les transitions de phase dans ces systèmes finis (il s'agit d'agrégats de quelques dizaines ou centaines d'atomes) est en fait mal comprise à l'heure actuelle. Des questions fondamentales ont été soulevées, notamment sur la validité du principe de microréversibilité que l'on postule dans la description statistique de ces phénomènes. Ce principe stipule que la probabilité d'évolution d'un état non dissocié donné vers un état dissocié donné est exactement la même que celle du processus inverse. La grande majorité des modèles utilisés actuellement (RRKM, Weisskopf, Phase Space Theory), dont dépend la validité des résultats cités au paragraphe précédent, supposent les systèmes microréversibles. Les ingrédients essentiels de ces modèles de fragmentation sont :

- La densité d'états du parent
- La densité d'états du fragment
- Le taux d'évaporation
- La section efficace de collage σ pour les modèles microréversibles

Les deux premières quantités peuvent être obtenues par des expériences de nanocalorimétrie.

¹ M.C.Heitz, G.Durand, F.Spiegelman, C.Meier, R.Mitric, V.Bonacic-Koutecky, J.Chem.Phys. 121 (20), 9906 (2004)

² R. Kusche, Th. Hippler, M. Schmidt, B.von Issendorf, H. Haberland, Eur. Phys. J. D 9, 1 (1999)

Il existe aussi de nombreuses mesures de taux d'évaporation. **Par contre, il n'y a aucune mesure de taux de collage d'atomes sur des agrégats.** C'est l'équilibre supposé entre dissociation et collage (évidemment statistiquement vrai à l'échelle macroscopique) qui fait apparaître comme paramètre la section efficace de collage σ , que l'on choisit toujours de façon extrêmement simple (voire simpliste). En général, σ est évalué dans un modèle de sphère dure, égal à une constante (la dimension de la cellule élémentaire dans le solide par exemple), multipliée par $N^{2/3}$, N étant le nombre d'atomes constituant l'agrégat. On ne tient donc pas compte de l'influence de structure électronique et de géométrie, qui module à l'évidence σ de façon non monotone en fonction de la taille de l'agrégat. Nous verrons d'autre part que, au moins pour les petites tailles, la section efficace de collage ne varie pas globalement comme $N^{2/3}$, mais comme N^α , $\alpha=1/2$ dans notre cas. Cet écart par rapport à une section efficace géométrique n'est pas une spécificité de notre système : par exemple, dans le collage d'un atome neutre sur un agrégat neutre liés par une interaction de Van der Waals, $\alpha=1/3$ et non $2/3$.

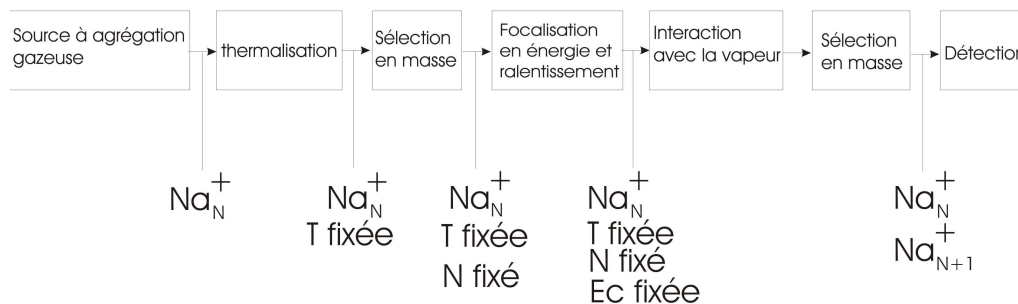
Nous avons choisi de mesurer dans un premier temps les sections efficaces de collage des atomes de sodium sur des agrégats de sodium, car ceux-ci font partie des agrégats les mieux connus, à la fois expérimentalement et théoriquement. En particulier, les expériences de calorimétrie de H.Haberland² ont été menées sur cet élément.

On peut se demander pourquoi des mesures de σ n'ont pas encore été effectuées, puisque c'est un paramètre essentiel. Cela tient à la difficulté de réaliser une telle expérience avec les dispositifs expérimentaux habituels: il est très facile de fragmenter un agrégat (il est même très difficile d'éviter qu'il ne se fragmente !), mais coller un atome sur un agrégat trié en masse suppose de maîtriser parfaitement l'énergie de collision, qui doit être très basse, sinon on obtient l'effet exactement inverse, à savoir une fragmentation de l'agrégat ! Il a donc fallu imaginer une technique permettant de réaliser des collisions (agrégat chargé sélectionné en masse, atome) à des énergies de collision de quelques dixièmes d'eV.

3.2.2.1. Dispositif expérimental

Manip collage : schéma de principe
Collage d'un atome Na sur un agrégat Na_N^+

On peut faire varier:
N : 2...200
T : 77 K ...500 K
Ec : 0,5...10eV



On mesure:
le nombre de Na_{N+1}^+ Formés et leur taux d'évaporation

Figure 4 : principe de l'expérience

Le principe de l'expérience est présenté sur la **Figure 4**. Des agrégats de sodium sont produits dans une source à agrégation gazeuse et ionisés par décharge de cathode creuse. Ils sont ensuite thermalisés par collisions avec un gaz neutre dans une enceinte dont on peut contrôler la température entre 77K et 500K. Après une première sélection en masse par temps de vol, l'agrégat de masse choisie doit être très fortement ralenti avant d'interagir avec la vapeur atomique. En effet, si l'énergie de collision dépasse quelque peu l'énergie de cohésion de l'agrégat, de l'ordre de l'électron volt, on aboutit au résultat exactement opposé à celui escompté, à savoir la dissociation de l'agrégat. Nous profiterons du fait que, dans notre cas, l'énergie dans le centre de masse (CM) est très inférieure à l'énergie cinétique dans le repère du laboratoire. Dans le repère du CM, nous espérons atteindre des valeurs de quelques dixièmes d'électron volts dès que la taille de l'agrégat est supérieure à 20.

La partie focalisation-collision est entièrement originale. Nous avons développé un spectromètre de masse dans lequel les agrégats ne sont pas focalisés en temps, comme dans un spectromètre de masse traditionnel de type Wiley Mc-Laren, mais sont focalisés en énergie. Le principe est représenté sur le schéma simplifié de la **Figure 5**. La simulation de distribution d'énergie cinétique de la **Figure 5**, de type monte-carlo, a été réalisée pour Na_{10} . On obtient aisément, en principe, des distributions d'énergie de largeur inférieure à l'eV. Après avoir focalisé les agrégats en énergie, il faut les ralentir à l'énergie voulue. Le ralentisseur est constitué de 14 plaques successives qui font croître le potentiel électrostatique exponentiellement et compensent les défocalisations spatiales grâce à une géométrie particulière.

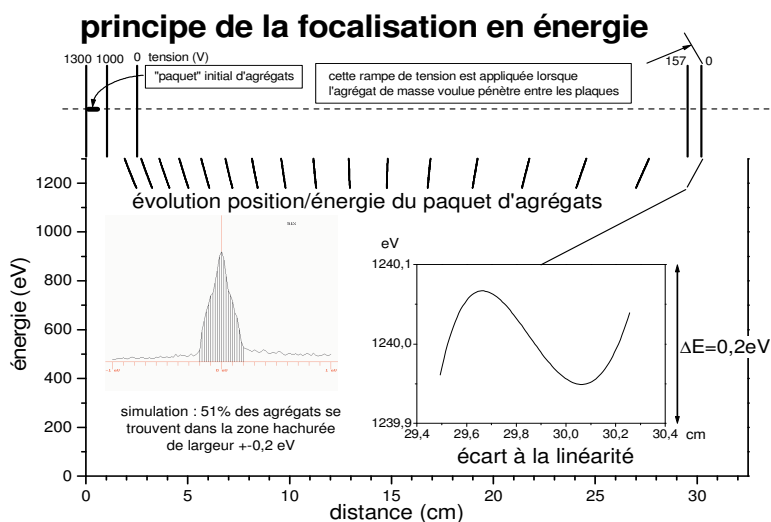


Figure 5 : principe du spectromètre de masse à focalisation en énergie

Les agrégats triés en masse et ralentis à l'énergie voulue traversent ensuite une cellule chauffée à environ 200°C contenant une vapeur atomique de sodium. C'est dans cette cellule que doit se produire la nucléation. L'énergie cinétique des atomes à cette température est de l'ordre de 0.1 eV. C'est l'énergie de collision minimale que l'on peut obtenir. Enfin, les

produits issus du collage sont triés en masse à la sortie de la cellule par un second spectromètre de masse de type Wiley-Mc-Laren avec un réflectron.

Nous pourrions mesurer l'énergie interne aussi bien des agrégats incidents Na_n que des agrégats produits Na_{n+1} par mesure de taux de dissociation induite par laser. Ce type de mesure a été déjà largement éprouvé en physique des agrégats³. Nous avons imaginé une technique nouvelle, possible uniquement dans notre expérience, pour détecter une éventuelle transition de phase solide-liquide à partir du rapport des taux de dissociation de l'agrégat initial Na_n et de l'agrégat produit Na_{n+1} . Cette mesure est basée sur l'existence d'une singularité de la capacité calorifique des agrégats au voisinage de la transition de phase (qui se traduit dans le solide massif par l'existence de la chaleur latente de fusion). Cependant, cette singularité est mal connue dans les agrégats et notre méthode de caractérisation demande à être validée.

3.2.2.2. Premiers résultats attendus

Pour chaque taille incidente n , nous mesurerons le taux d'agrégats de taille supérieure $n+1$ (voire $n+2$ ou $n+3$) produits au sein de la cellule de collage, ceci en fonction de la température initiale et de l'énergie de collision, toutes deux ajustable.

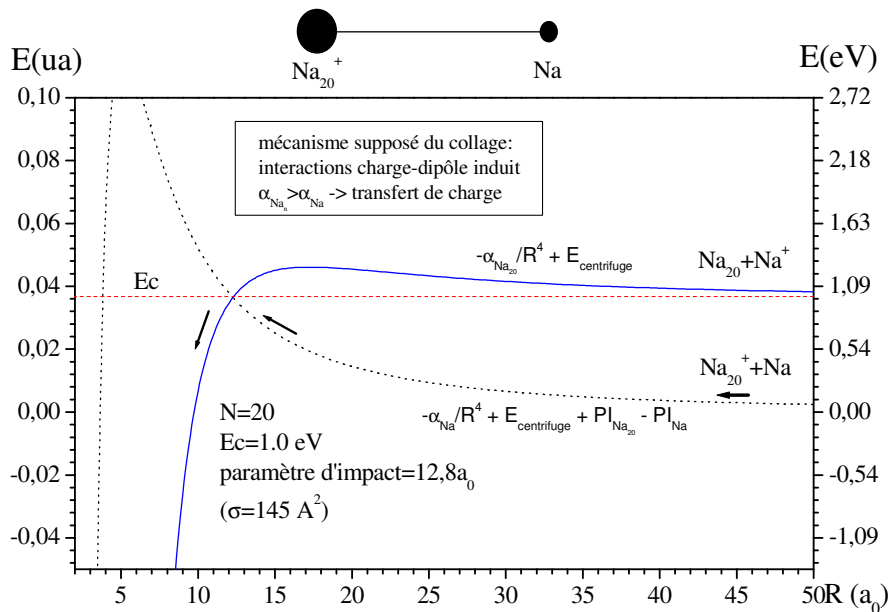


Figure 6 : modèle simplifié d'interaction agrégat-atome

Afin d'estimer les sections efficaces de collage attendues, nous avons calculé l'interaction agrégat chargé-atome dans un modèle simple, de type « harponnage », schématisé sur la **Figure 6** dans le cas de la collision $\text{Na}_{20}^+ + \text{Na}$. Dans ce modèle, la section efficace de collage est déterminée par un transfert d'électron depuis l'atome vers l'agrégat chargé positivement induit par la grande différence de polarisabilité entre les deux partenaires. La section efficace est dans ce cadre déterminée par le plus grand paramètre d'impact pour lequel la barrière centrifuge est inférieure à l'énergie de collision. Elle varie globalement approximativement comme $N^{1/2}$. Le cas limite est représenté sur la figure, dans lequel la

³ M. Schmidt, R.Kusche, W.Kronmüller, B.von Issendorf, H.Haberland, Phys. Rev. Lett. 79, 99 (1997)

hauteur de la barrière centrifuge (à peu près au croisement des deux courbes) est égale à l'énergie cinétique disponible E_c . Pour les grandes tailles ($n > 70$), c'est la section efficace géométrique (variant comme $N^{2/3}$), plus grande que la section efficace de harponnage, qui devient pertinente.

La **Figure 7** présente les sections efficaces calculées pour les collisions $Na_n^+ + Na \rightarrow Na_{n+1}^+$ à partir du modèle présenté ci-dessus. Les oscillations proviennent essentiellement des oscillations paire/impaire du potentiel d'ionisation de l'agrégat, bien connues dans les agrégats métalliques.

estimation des sections efficaces de collage $Na_n^+ + Na \rightarrow Na_{n+1}^+$ dans le modèle de transfert de charge

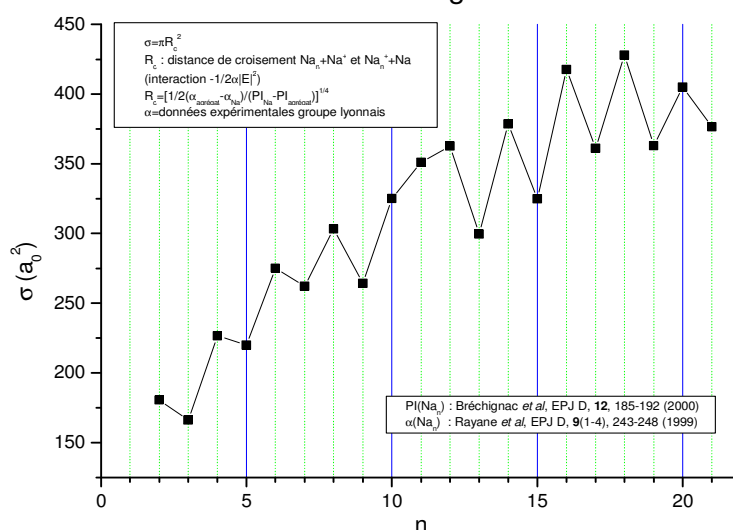


Figure 7: section efficaces de collage attendues pour les agrégats de sodium. Les polarisabilités des agrégats Na_n^+ sont celles déterminées expérimentalement par l'équipe de Ph. Dugourd (LASIM, Lyon).

3.2.2.3. Lien avec les théories classiques macroscopiques de la nucléation

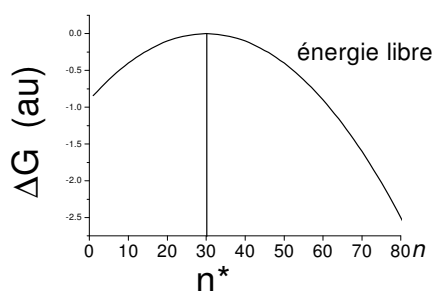


Figure 8 *Energie libre de Gibbs en fonction de la taille n de l'agrégat*

Nous n'entrerons pas ici dans les détails mais donnerons les idées essentielles de ces théories. Elles sont de nature thermodynamique, basées sur les propriétés de l'énergie libre de formation d'une gouttelette, c'est-à-dire l'énergie qu'il faut fournir pour passer de la taille n à la taille $n+1$. On utilise en général l'énergie libre de Gibbs $G(n, \Delta\mu)$. $\Delta\mu$ est la différence de potentiel chimique entre les deux phases, liquide et gaz par exemple. L'hypothèse fondamentale est qu'il existe une taille critique n^* pour laquelle le taux d'évaporation égale le taux de croissance. Cette taille n'est cependant pas une taille d'équilibre puisque

la fonction $\Delta G(n, \Delta\mu)$ présente un maximum et non un minimum en n^* (voir **Figure 8**).

L'expression fondamentale de ces théories^{4,5}, dénommée « théorème de nucléation », relie la taille critique n^* au travail de nucléation W^* :

⁴ D.W.Oxtoby and D.Kashchiev, J.Chem.Phys. 100, 7665 (1994)

⁵ D.Kashchiev, J.Chem.Phys. 76, 5098 (1982)

$$\frac{dW^*}{d\Delta\mu} = -n^* + \frac{\partial F^*}{\partial \Delta\mu} \quad \text{où } W^* = \Delta G(n^*, \Delta\mu) \quad (1)$$

F est une contribution à l'énergie libre spécifique aux nanoparticules, généralement associée à l'énergie de surface dans l'approximation dite *capillaire*.

La théorie du complexe activé, quant à elle, permet de relier le taux de réaction J à l'énergie libre :

$$J = A \exp(-W^*/kT) \quad (2)$$

A est un préfacteur cinétique extrêmement délicat à évaluer théoriquement.

Les équations (1) et (2) permettent de déduire indirectement la taille critique n^* des mesures

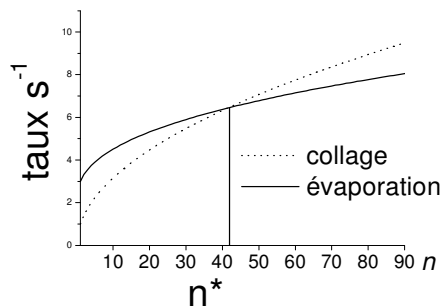


Figure 9 Courbe d'évaporation et de collage réalisables dans notre expérience.

expérimentales de J dans les expériences « traditionnelles » de nucléation. Dans notre expérience, par contre, nous pourrions mesurer **directement**, pour la première fois, la valeur de la taille critique de nucléation n^* . Bien que la validité des théories de nucléation puisse être mise en doute pour les petites valeurs de n^* mesurées jusqu'ici⁶, les arguments théoriques laissent supposer qu'une telle taille critique existe bien. Lorsque cette taille critique est atteinte, le taux d'évaporation compense exactement le taux de collage. Or, nous serons en mesure de déterminer à la fois les sections efficaces

de collage et la probabilité d'évaporation en fonction de la taille (**Figure 9**). Il sera possible de déduire directement de ces mesures les conditions qui, dans une vapeur, réaliseront l'égalité des taux de collage et d'évaporation. Il suffit pour cela de supposer une relation entre densité, température et énergie cinétique dans la vapeur.

3.2.2.4. Etat d'avancement de l'expérience de nucléation

La mise au point de la partie « originale » de l'expérience, c'est-à-dire le dispositif de focalisation en énergie et de ralentissement d'agrégats triés en masse, a débuté vers septembre 2004. Nous avons tout d'abord testé la partie focalisation, en utilisant le réflectron pour créer une barrière de potentiel variable sur le trajet des agrégats. L'enregistrement du signal d'ions, détecté en aval du réflectron, en fonction de la tension de barrière appliquée, nous donne accès à la distribution de vitesse par dérivation de ce signal. Les variables à ajuster sont les valeurs de hautes tensions générées en impulsions et les retards entre ces impulsions. Bien que le calcul nous donne les valeurs théoriques à appliquer, les imperfections du dispositif et les incertitudes sur certains paramètres tels la vitesse initiale des agrégats issus de la source rendent très difficile l'ajustement de ces paramètres. Les tensions, de l'ordre du kV, doivent être ajustées avec une précision supérieure au volt, et les retards à quelques nanosecondes près. De plus, nous travaillons dans un espace de paramètres multidimensionnel interdépendants, ce qui rend délicat l'optimisation. Nous avons réussi à obtenir de façon reproductible des distributions d'énergies de largeur inférieure à 3-5 eV, limite de précision de la méthode. Grâce à ce premier travail, il a été possible de poursuivre l'optimisation plus finement en utilisant une technique plus directe : en appliquant cette fois-ci une tension de ralentissement, on mesure le signal en fonction du temps d'établissement de l'impulsion d'accélération du second temps de vol (*TOF* sur la Figure 10). Puisqu'on connaît le moment où l'agrégat quitte la zone de ralentissement, on en déduit sa vitesse puisqu'on connaît alors le

⁶ J. Wölk, R. Strey, J. Phys. Chem. B **105**, 11683 (2001)

temps mis pour parcourir une distance connue (c'est la distance d représentée sur la **Figure 10**).

Le dispositif expérimental est aujourd'hui quasiment opérationnel. La faisabilité des expériences de collages est démontrée : nous sommes d'ores et déjà capables de produire des agrégats de masse voisine de 100 sélectionnés en masse, thermalisés, à une énergie cinétique inférieure à 8 ± 0.5 eV dans le repère du laboratoire, soit de l'ordre de 0.15 eV dans le repère du centre de masse. Cette valeur est déjà suffisamment basse pour réaliser des expériences de collages. Nous évaluons directement l'énergie cinétique des agrégats en mesurant leur temps de parcours depuis la sortie de la zone de ralentissement jusqu'au second temps de vol. La **Figure 10** présente une distribution d'énergie cinétique obtenue pour Na_{82} .

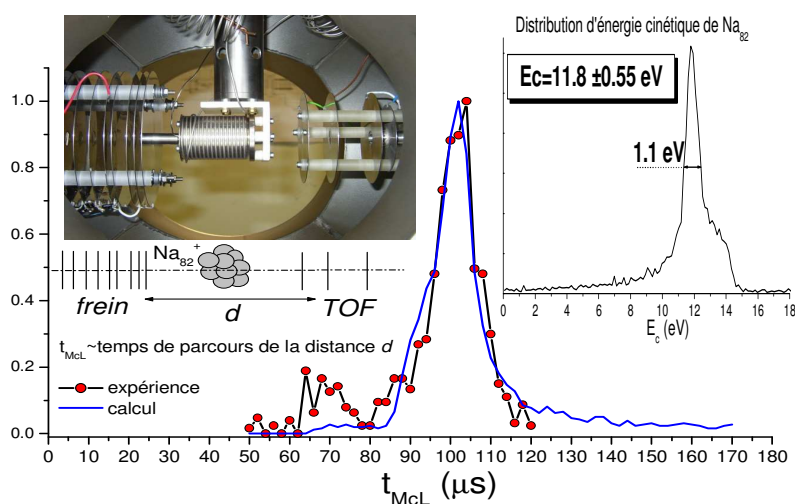


Figure 10 : Mesure pour Na_{82} du signal en fonction du délai t_{McL} entre le temps d'établissement de l'impulsion HT du second temps de vol et la sortie du ralentisseur. En haut à droite est présentée la distribution d'énergie cinétique correspondante.

3.2.3. Projet : collage sur des agrégats d'eau

3.2.3.1. Insertion du projet dans le contexte scientifique

Les nuages résultent de la condensation de vapeur d'eau dans l'atmosphère, ou en d'autres termes de l'agrégation successive de molécules d'eau initialement sous forme gazeuse. La description de ce phénomène en apparence simple est en fait d'une grande complexité. A vrai dire, les physiciens sont encore aujourd'hui incapables de le décrire correctement. Cette question jouit depuis une décennie d'un intérêt accru à cause de son implication dans l'évolution du climat global. Les nuages stratosphériques, aussi dénommés *cirrus*, jouent un rôle essentiel dans l'équilibre thermique de la terre. Il y a deux raisons à cela : d'une part, ils sont largement transparents au rayonnement solaire incident et réfléchissent l'infrarouge réémis par la terre, contribuant ainsi à réchauffer l'atmosphère. D'autre part, on suppose qu'ils sont responsables de la destruction de la couche d'ozone en catalysant la formation de chlore atomique, responsables de la transformation de l'ozone en dioxygène, à partir des molécules ClONO_2 qui, en l'absence de cette catalyse, constituent le produit final inerte du cycle de destruction de l'ozone. Comprendre les mécanismes de nucléation de l'eau est donc un enjeu d'actualité important.

Pourquoi connaît-t-on si mal les processus de nucléation de l'eau ? L'eau est un corps aux propriétés physico-chimiques particulièrement déroutantes et difficiles à décrire

théoriquement. Au niveau moléculaire, la difficulté de modélisation provient de la nature des liaisons en jeu, notamment la liaison hydrogène, qui se prêtent mal aux approximations nécessaires lorsqu'on traite plusieurs particules en interaction. Deuxièmement, le processus de nucléation parcourt différentes échelles de la physique, depuis la molécule unique jusqu'à la gouttelette macroscopique. Ces deux échelles ne peuvent pas être décrites dans une approche théorique commune. Les molécules d'eau sont décrites par la mécanique quantique, tandis que les propriétés des gouttelettes, la capillarité ou sa vitesse limite de chute dans l'atmosphère, par exemple, se calculent dans le cadre de théories purement macroscopiques. Entre ces deux extrêmes, la « nanogouttelette » de quelques dizaines, centaines ou milliers de molécules relève de la physique des agrégats, domaine dans lequel notre groupe est spécialisé depuis plusieurs années.

3.2.3.2. Justification et Description du projet

L'approche expérimentale traditionnelle de la nucléation consiste à mesurer le taux de nucléation de gouttelettes, c'est-à-dire la densité de gouttelettes formées à partir de conditions gazeuses dans des enceintes où l'on maîtrise les conditions de densité, de température et de pression. Les mesures consistent à détecter la diffusion de Mie d'un faisceau laser, qui est reliée à la taille des particules. Elles permettent de caractériser la taille moyenne des particules, mais est limitée à des tailles déjà macroscopiques dans l'acception définie plus haut. On peut également, en mesurant le taux de dépolarisation du laser, évaluer la proportion de particules solides et liquides.

Dans notre projet, nous mesurerons les taux de nucléation de particules d'eau constituées d'une dizaine à quelques centaines de molécules. Une bonne description de ce domaine de tailles est essentielle pour comprendre le phénomène général de nucléation. En effet, les modèles thermodynamiques actuellement en vigueur supposent l'existence d'une taille critique à partir de laquelle la croissance devient exponentielle et conduit inéluctablement et très rapidement à la formation d'une gouttelette macroscopique. Dans les conditions atmosphériques, cette taille critique n'est que de quelques dizaines ou centaines de molécules. Malheureusement, ces modèles (voir paragraphe 2.4.) sont basés sur des concepts purement macroscopiques, tels que la capillarité (d'où leur nom générique de modèles capillaires), et sont inadaptés à la description de particules de si petite taille.

Un numéro spécial de la revue *Journal of Physical Chemistry B*⁷ a récemment été consacré à la nucléation dans les aspects ci-dessus évoqués.

Nos outils expérimentaux seront les mêmes que ceux utilisés dans les expériences sur le sodium. Concrètement, nous pourrions ainsi déterminer des taux de nucléation homogène et hétérogène, qui ne sont connus qu'à plusieurs ordres de grandeur près⁷ pour l'eau dans les conditions atmosphériques.

3.2.3.3. Description du projet et résultats attendus

3.2.3.3.1. Nuages et agrégats d'eau

Les nuages résultent de la nucléation de l'eau dans des conditions de sursaturation, c'est-à-dire quand la pression partielle d'eau est supérieure à sa pression de vapeur saturante. Leur formation ne résulte probablement pas d'une nucléation homogène. Pawlowski et ses collaborateurs⁸ estiment que dans l'air à 20°C sursaturé à 200% il faudrait 10^{46} ans pour former une goutte par cm^3 par nucléation homogène! C'est la présence de germes de nucléation qui rend possible la condensation de l'eau en gouttes dans les nuages. L'acide sulfurique H_2SO_4 est suspecté d'être un des principaux agents de nucléation dans

⁷ J. Phys. Chem. B 105, Special Issue *Howard Reiss Festschrift* (2001)

⁸ P. M. Pawlowski, S. R. Okimoto, F.M. Tao, J. Phys. Chem. A 107, 5327 (2003)

l'atmosphère. L'énergie de liaison de l'eau avec les composés $H_2SO_4(H_2O)_n$ est forte, d'où des constantes élevées (comparées à la nucléation homogène) de réactions de type : $H_2SO_4(H_2O)_n + H_2O \rightarrow H_2SO_4(H_2O)_{n+1}$. Ceci est connu à l'échelle macroscopique, a été calculé par les méthodes de la chimie quantique pour les tout petits systèmes ($n=1..6$)⁸, mais n'a jamais été ni calculé ni mesuré à l'échelle des agrégats. Une connaissance quantitative de ces taux de réaction est importante dans la mesure où une très petite variation de section efficace induit des différences phénoménales dans les taux de formation de gouttelettes.

La formation des cirrus

Les cirrus polaires de haute altitude, appelés PSC (Polar Stratospheric Clouds), sont généralement formés de particules solides. Couvrant jusqu'à 30% de la surface de la terre, ils sont quasiment transparents dans le visible et très absorbants dans l'infrarouge, et contribuent ainsi à l'effet de serre⁹. Les cirrus sont composés de microgouttelettes, homogènes ou hétérogènes (parfois liquides, en surfusion) essentiellement de trois types^{9,10} classés selon une nomenclature standard:

Type **Ia** : $(H_2O)_n(HNO_3)_p$ (1 μm de diamètre, liquide en surfusion)

Type **Ib** : $(H_2O)_n(HNO_3)_p(H_2SO_4)_q$ (1 μm de diamètre, cristallin)

Type **II** : $(H_2O)_n$ (10-100 μm de diamètre, cristallins)

Notons que dans les cirrus stratosphériques (de 15 km à 50 km d'altitude), la nucléation homogène de glace, qui forme des cristaux de type **II**, est beaucoup plus probable que dans la troposphère (couche basse de l'atmosphère). En effet, dans les conditions de pression et de température qui y règnent, le point de gelée blanche est facilement atteint: à 20km d'altitude, zone privilégiée de formation des nuages stratosphériques polaires, la température est de 185 K, la pression de 60 mbar et le point de gelée est à 188 K pour une pression partielle en eau de 5 ppmv.

La présence de particules **Ia**, **Ib** et **II** n'est qu'une hypothèse. On ne connaît ni les stœchiométries privilégiées ni les mécanismes de formation. Le degré d'hydratation (valeur de n/p dans une particule $(H_2O)_nM_p$, calculé en moyenne dans les liquides, dans une maille élémentaire dans les cristaux) des particules de type **I** les plus probablement formées ou les plus stables est encore sujet à controverse^{10,11}. Imre et ses collaborateurs¹¹ ont montré que les particules constituées de sous-unités $(H_2O)_n/H_2SO_4$ semblent, dans les conditions stratosphériques, plus stables pour $n=8$ que pour $n=4$, comme cela était supposé. De même, la question de la prééminence, dans les cristaux de type **Ia**, de dihydrate $(H_2O)_2/HNO_3$ (NAD) ou de trihydrate $(H_2O)_3/HNO_3$ (NAT) reste posée. La communauté des physico-chimistes de l'atmosphère est intéressée par toute avancée concernant non seulement les mécanismes élémentaires de nucléation de ces particules, mais aussi leur stabilité aux tailles microscopiques. Par ailleurs, dans les années 1970 certains auteurs ont suggéré que les particules émises par les réacteurs d'avions pouvaient avoir un effet non négligeable sur la formation des cirrus^{12,13,14}. On sait déjà que les traînées de condensation laissées derrière eux par les avions sont de même nature que les cirrus, mais on n'en connaît pas les mécanismes de formation. En effet cette condensation de l'eau ne devrait pas se produire, du moins avec cette importance, sur de tels germes puisque les particules émises, probablement du type HAP (Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques), sont *a priori* très hydrophobes. L'équipe de O. Popovitcheva (Institute of Nuclear Physics, Moscow State University, 119 992, Moscow,

⁹ M.A. Zondlo, P. K. Hudson, A.J. Prenni, M.A. Tolbert, Ann. Rev. Phys. Chem. 51, 473 (2000)

¹⁰ T.J. Fortin, K. Drdla, L.T. Iraci, M.A. Tolbert, Atmos. Chem. Phys. 3, 987 (2003)

¹¹ D.G. Imre, J. Xu, A.C. Tridico, Geophysical Research Letters 24 (1), 69 (1997)

¹² P.J. Crutzen, J. R. Meteorol. Soc. 96, 320 (1970)

¹³ H.S. Johnston, Science 173, 517 (1971)

¹⁴ "Ice, Soot and Aviation : what Impact on Environment ?", La Londe Les Maures, France, may 10-14 (2004)

Russia) tente de caractériser la nature exacte des particules émises par les réacteurs; pour notre part, nous mesurerons les sections efficaces de nucléation de molécules d'eau sur des nanoparticules carbonées dont la nature exacte reste à déterminer en fonction des résultats obtenus par O. Popovitcheva.

3.2.3.3.2. La nucléation de l'eau : aspects fondamentaux

Limites de l'approche classique de la nucléation

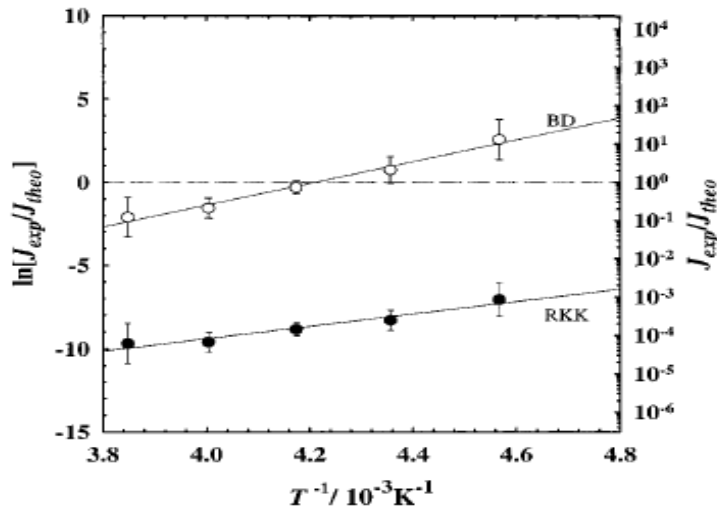


Figure 11 : Nucléation de l'eau : comparaison expérience/théorie. J_{exp} : taux de nucléation expérimentaux. BD et RKK : deux variantes de la théorie classique de nucléation. Attention, l'ordonnée représente le log de l'écart relatif expérience-théorie! (Figure extraite de la référence⁶).

Le stade initial de la formation de nanoparticules d'eau est mal connu, bien qu'au niveau macroscopique, de nombreuses études aient mesuré les taux de nucléation de gouttelettes d'eau, c'est-à-dire le nombre de gouttelettes formées dans une enceinte par unité de temps et de volume dans des conditions de température et de pression partielle d'eau maîtrisées⁶. Des effets isotopiques ont même été observés par J. Wölk et ses collaborateurs⁶ : dans leurs conditions expérimentales, le taux de nucléation de D₂O est 2500 fois plus grand que celui de H₂O pour une même température et une même pression. Dans la gamme

de température explorée (entre 220 et 260 K) cependant, les deux taux de nucléation sont semblables en fonction du paramètre de supersaturation, ce qui semble bien conférer à ce paramètre une certaine pertinence. Les théories classiques de nucléation sont clairement mises en échec (voir **Figure 11**). Merikanto et ses collaborateurs¹⁵ ont simulé par une méthode Monte Carlo ces expériences. Ils estiment reproduire de façon satisfaisante ces résultats expérimentaux (« ...agree well with the experimental data ...») bien que les taux de nucléation calculés soient surestimés par un facteur 2×10^4 et que les simulations soient incapables de reproduire la différence isotopique d'un facteur 2500 mentionnée plus haut! Ceci mesure bien le chemin qu'il reste à parcourir.

Quelques expériences intéressantes ont également déjà été consacrées aux transitions de phase dans les nanoparticules d'eau. En particulier, Huang s'est intéressé à la nucléation, ici comprise comme transition liquide-solide, de nanoparticules d'eau d'environ 5000 molécules produites en jet moléculaire supersonique¹⁶. La structure des agrégats est sondée par diffraction électronique, directement à la sortie de la tuyère du jet supersonique. Cette technique, astucieuse, ne détermine pas directement la température, mais donne une mesure moyennée sur une large distribution de masses, et concerne des particules évoluant dans les conditions très particulières d'une expansion supersonique. Le résultat le plus clair est que l'eau, initialement surfondue dans ces conditions, cristallise sous forme de réseau cubique Ic, et non sous la forme hexagonale Ih. Selon les auteurs, cela explique les différences d'une dizaine d'ordres de grandeur, voire plus, avec les prédictions des théories classiques de

¹⁵ J. Merikanto, H. Vehkamäti, E. Zapadinsky, J. Chem. Phys. 121(2), 914 (2004)

¹⁶ J. Huang, L. Bartell, J. Phys. Chem. 99, 3924 (1995)

nucléation. Des ajustement *ad hoc*, notamment de la tension superficielle σ_{SL} , sont introduites dans les modèles afin de tenter de réconcilier théorie et expérience. La relation empirique proposée par Turnbull¹⁷ en 1964 $\sigma_{SL}(T) = \sigma_{SL}(T_1)(T/T_1)^n$ est toujours utilisée. La valeur de n est ajustée afin de reproduire au mieux l'expérience. Cependant, même le signe de n est encore sujet à controverse!

La littérature sur le sujet est trop volumineuse pour que nous en fassions le tour ici. Nous avons cité les deux exemples ci-dessus essentiellement afin de montrer que l'approche usuelle des problèmes de nucléation est assez empirique et encore très peu prédictive et explicative. L'approche « moléculaire », telle que nous l'envisageons, devrait apporter une connaissance plus solide et quantitative de ces phénomènes.

3.2.3.3. Notre contribution

Par des expériences analogues à celles menées sur le sodium, nous mesurerons les sections efficaces de collage de molécules d'eau sur des agrégats d'eau de taille et de température variables et connues. Comme dans la cas du sodium, afin de sélectionner en masse, de focaliser en énergie et de ralentir les agrégats, nous devons nécessairement travailler sur des espèces chargées $(H_2O)_nH_3O^+$. La source devra évidemment être différente. Le type de source à utiliser n'est pas encore définitivement choisi. Plusieurs options sont possibles : une source à agrégation gazeuse et ionisation par décharge de cathode creuse modifiée, une source de type électrospray, un tube à décharge Corona,... Nous travaillons actuellement à définir la solution optimale.

Les agrégats d'eau seront ensuite thermalisés de la même façon que le sodium, puis focalisés en énergie et ralentis. L'énergie de liaison par molécule d'un agrégat d'eau, de l'ordre de 0.5 eV, est compatible avec les expériences de collage : nos estimations montrent que, d'une part, les agrégats thermalisés entre 150 K (limite basse de température accessible) et la température ambiante ont une durée de vie suffisante pour atteindre la cellule de collage ; d'autre part, leur durée de vie après collage d'une molécule dans la cellule est également suffisante pour atteindre le détecteur sans se dissocier.

Plusieurs expériences sont envisagées :

i) Nucléation homogène

Nous mesurerons les sections efficaces des réactions $(H_2O)_n + H_2O \rightarrow (H_2O)_{n+1}$ et les taux de dissociation des produits formés. Il devrait être possible de photodissocier les agrégats d'eau en les excitant dans la bande de la vibration O-H, autour de $3\mu m$. Bien que des calculs plus précis restent à faire, l'énergie par photon correspondante, d'environ 0.4 eV, devrait provoquer des évaporations mesurables dans les fenêtres de temps accessibles. Le rayonnement à $3\mu m$ pourrait être engendré par la source d'impulsions femtoseconde disponible dans une autre équipe de notre laboratoire avec qui nous avons déjà collaboré. Nous étudierons la possibilité de déduire de ces taux de dissociation la phase (solide ou liquide) des réactants et des produits. Ce dernier aspect est particulièrement intéressant dans le cadre de l'orientation « physique des nuages ». Nous avons déjà parlé du cas des cirrus. L'aspect « surfusion » intéresse également les nuages de la troposphère : en effet, des gouttelettes d'eau sont présentes sous les deux formes liquides (en surfusion) et solide dans les nuages dits mixtes, entre 2 km et 8 km d'altitude), à des températures comprises entre 0°C et -40°C, limite connue de la surfusion. Dans ces nuages, les gouttes solides ne deviennent majoritaires qu'en dessous de -8°C.

¹⁷ D. Turnbull, in *Physics of non-crystalline solids*, ed. J.A. Prins, North-Holland, Amsterdam (1964)

ii) Nucléation hétérogène

Le but est de mesurer les sections efficaces des réactions $(\text{H}_2\text{O})_n + \text{Y} \rightarrow (\text{H}_2\text{O})_n\text{Y}$ et la phase des produits. Outre l'influence de Y sur les taux de nucléation, dont nous avons déjà parlé, nous pourrions examiner l'influence de Y sur la phase de l'agrégat formé. Le réactant Y sera, dans un premier temps, de l'acide sulfurique, nitrique, ou un mélange des deux, afin de reproduire les particules de type **Ia** et **Ib** présentes dans les cirrus. Le réactant Y pourra aussi être une particule carbonée (PAH, Fullerènes) afin de reproduire les suies émises par les avions. Il serait également intéressant de sonder une propriété liée à la géométrie : il est généralement admis que le gel d'une particule en surfusion peut être provoqué par un effet stéréochimique : les germes de symétrie hexagonale et de dimension de maille voisine de celle de l'eau (environ 0.45 nm) provoquent le gel dès 0°C.

iii) Collisions avec un gaz rare

Il sera intéressant d'étudier l'effet de collisions non collantes avec un gaz rare sur la phase des agrégats, par exemple $(\text{H}_2\text{O})_n + \text{Ar} \rightarrow (\text{H}_2\text{O})_n^* + \text{Ar}$. On sait qu'un apport d'énergie mécanique peut « quencher » la surfusion. De nombreuses expériences de « sonocristallisation » ont été récemment menées^{18,19}. Elles consistent à soumettre un échantillon d'eau surfondue à une vibration ultrasonique. On observe alors, sous certaines conditions, une cristallisation induite. Au niveau microscopique, un apport d'énergie mécanique sous forme de collision avec un atome de gaz rare est-il capable de provoquer une telle cristallisation sur un agrégat surfondu ? Telle est la question à laquelle nous aimerions répondre.

Modélisation et simulations numériques

Nous compléterons notre travail expérimental par une étude théorique par modélisation et simulations, en collaboration avec F. Calvo et F. Spiegelman (LPQ, IRSAMC). Cette étude devra permettre d'estimer avec une plus grande précision certaines propriétés calorimétriques (point de fusion, taux d'évaporation,...) et dynamiques (sections efficaces de collage) pour des agrégats purs ou hétérogènes. La description des interactions entre molécules nécessitera un effort de modélisation en particulier en présence d'impuretés. Alors que divers potentiels moléculaires sont disponibles pour l'eau pure neutre²⁰ et protonée²¹ ainsi que pour un mélange eau-acide sulfurique²² globalement neutre, il nous faudra extraire des potentiels pour ce mélange protoné à partir de calculs de chimie quantique. Les phases et le point de fusion seront évalués par simulations Monte Carlo et les sections de collage par dynamique moléculaire.

Ce projet a fait l'objet d'une demande de financement dans le cadre de l'ANR qui vient d'être retenue.

¹⁸ T. Hozumi, A. Saito, S. Okawa, T. Matsui, Int. J. of Refrigeration 25 (7), 948 (2002)

¹⁹ X. Zhang, T. Inada, A. Yabe, L. Shushen, Y. Kosawa, Int. J. of Heat and Mass Transfer 44 (23), 4533 (2001)

²⁰ ex : TIP4P, W.L. Jorgensen, J. Chandrasekar, J.D. Madura, J. Chem. Phys. 79, 926 (1983)

²¹ ex : R. Vuilleumier and D. Borgis, Chem. Phys. Lett. 284, 71 (1998)

²² S.M. Kathmann and B.N. Hale, J. Phys. Chem. B 105, 11719 (2001)

3.2.4. Topographie des surfaces de potentiel d'agrégats et transitions de phase

Ce travail est l'œuvre de P. Labastie

Toute la thermodynamique d'un agrégat est contenue dans sa densité d'état configurationnelle, qui elle-même ne dépend que de la surface de potentiel. Or il est extrêmement difficile de visualiser la topographie de cette surface à grand nombre de dimensions, en particulier de déterminer les caractéristiques qualitatives nécessaires à l'apparition d'une transition de phase, quand on utilise les coordonnées cartésiennes qui décrivent les translations et les rotations du système en même temps qu'elles permettent l'exploration de la surface de potentiel. En fait, en physique, le choix des « bonnes » coordonnées est souvent crucial pour résoudre un problème.

L'idée de base de ce travail, c'est d'utiliser comme coordonnées les distances interatomiques. Beaucoup de potentiels sont basés sur une somme de potentiels de paires, ou sur la diagonalisation d'un hamiltonien dépendant des distances. De plus les distances interatomiques sont invariantes par rotation du système.

Malheureusement, un écueil de taille semble invalider cette idée : ces distances interatomiques ne sont pas indépendantes dès que le nombre d'atomes est supérieur à 4 (dans un espace à trois dimensions). Toutefois, les contraintes sur ces distances sont connues. Elles sont de deux types. Des égalités, définissant une variété dans l'espace des distances, et des inégalités, limitant la partie accessible de cette variété.

En fait, en plus du calcul de la densité d'état configurationnelle, l'étude d'une surface de potentiel requiert souvent la connaissance :

2. des minima locaux et du minimum absolu ;
3. de la dynamique sur cette surface.

Pour la recherche des minima locaux d'ensembles de N particules, on peut utiliser une méthode de Lagrange avec $N(N-1)/2$ variables de distances et $(N-4)(N-3)/2$ contraintes. Le coût numérique paraît lourd, par rapport aux $3N$ variables cartésiennes. Toutefois, la résolution de $(N-4)(N-5)/2$ des équations de Lagrange est triviale. La complexité est donc du même ordre de grandeur qu'en cartésienne.

Pour la recherche de minima globaux, nous proposons une méthode indépendante du potentiel utilisé. Parmi les $N(N-1)/2$ distances interatomiques, seules $3N-6$ sont indépendantes. C'est donc le nombre maximum de distances qui peuvent être choisies égales à la distance d'équilibre r_0 d'un potentiel de paire. On peut calculer les autres distances en utilisant les équations des contraintes. Si on a toutes les configurations avec $3N-6$ distances égales à r_0 , il y a de fortes chances que l'une d'entre elle soit très proche de la configuration correspondant au minimum global du potentiel. Mais l'obtention de ces configurations n'est qu'un problème de théorie des graphes, pour lequel de puissants algorithmes existent. Nous travaillons actuellement à accélérer la résolution des équations de contraintes en utilisant des méthodes issues des mathématiques appliquées pour la résolution d'équations polynomiales.

D'autre part, nous avons obtenu quelques résultats (en cours de rédaction) pour une étude qualitative de la densité d'état configurationnelle de très petits agrégats, montrant que la frustration impliquée par la limitation de l'espace accessible pourrait expliquer la transition solide-liquide dans les petits systèmes. Ces développements extrêmement prometteurs seront poursuivis au cours du prochain contrat.

3.2.5. Conclusion

Jusqu'à la fin de l'année 2002 ont été menées, en collaboration avec l'équipe *Spectroscopie moléculaire ultrarapide et contrôle cohérent* des expériences de spectroscopie ultrarapide sur l'agrégat Na_3F , complétées par des expériences de spectroscopie par photodépopulation. Fin 2002 a débuté le montage d'une nouvelle expérience visant à étudier au niveau moléculaire le phénomène de nucléation des agrégats. Le dispositif expérimental, dont le principe est original, est actuellement en phase finale de tests sur un système modèle, le sodium. La progression de la mise au point s'est accélérée depuis septembre 2004 grâce à la présence d'un nouveau doctorant, Fabien Chirot, et d'un nouveau membre permanent dans notre équipe, Sébastien Zamith. Ce dispositif est aujourd'hui presque opérationnel et a déjà démontré la faisabilité des expériences envisagées : nous sommes capables de produire des agrégats dans des conditions qui permettent théoriquement le collage d'un atome. Les premiers essais de collage devraient avoir lieu avant la fin de l'année 2005.

3.3. Collaborations nationales et internationales

Dates	Programme/ financement	Correspondant	Université/ Institut –ville	Pays	Thème	Publications
2003	LCAR	V. Blanchet	UPS Toulouse	France	Spectroscopie femtoseconde de Na_3F : expériences	3
2003	LCAR	M.C. Heitz	UPS Toulouse	France	Spectroscopie femtoseconde de Na_3F : théorie	3
2002	GDR agrégats	P. Dugourd	LASIM Lyon	France	Mesures de dipôles d'agrégats Na_nF_p	7

3.4. Soutiens financiers obtenus au cours des 4 années

Dates	Programme	Titre du projet	Montant k€
2003	Action spécifique CNRS	Spectromètre à agrégats	20
2003-2004	PROCOPE	Dynamique d'agrégats d'alcalins	8

3.5. Publications

3.5.1. Publications dans des revues à comité de lecture

2005

- 1) F. Calvo, P. Labastie, "Computer simulation of the shape and phase transitions, in finite systems", Eur. J. Phys., 26, S23-30 (2005)
- 2) S. Zamith, Z. Ansari, F. Lepine and M.J.J. Vrakking "Single-shot measurement of revival structures in femtosecond laser-induced alignment of molecules" Opt. Lett. 30, 2326-2328 (2005)
- 3) T. Schlatholter, R. Hoekstra, S. Zamith and M.J.J. Vrakking "Response of polyatomic molecules to ultrastrong laser- and ion-induced fields" Phys. Rev. Lett. 94, 233001/1-4 (2005)

2004

- 4) J.M. L'Hermite, V. Blanchet, A. Le Padellec, B. Lamory and P. Labastie, "Relaxation of photoexcited Na₃F." Eur. Phys. J. D 28, 361–366 (2004)

2003

- 5) T. Nzeyimana, E.A. Naji, X. Urbain and A. Le Padellec "Merged beam study of the associative ionisation (C⁺, N⁺ and O⁺) + O⁻" Eur. Phys. J. D, 19, 315-325, (2002)
- 6) Al-Khalili, S. Rosen, H. Danared, A. M. Derkatch, A. Källberg, M. Larsson, A. Le Padellec, A. Neau, J. Semaniak, R. Thomas, M. af Ugglas, L. Viktor, W. Zong, W.J. van der Zande, X. Urbain, M.J. Jensen, R.C. Bilodeau, O. Heber, H.B. Pedersen, C.P. Safvan, L. Andersen, M. Lange, J. Levin, G. Gwinner, L. Knoll, M. Scheffel, D. Schwalm, R. Wester, D. Zajfman and A. Wolf "Absolute High-Resolution Rate Coefficients for Dissociative Recombination of Electrons with HD⁺: Comparison of Results from Three Heavy Ion Storage Rings" Phys. Rev. A, 68, 042702/1-14, (2003)
- 7) K. Fritioff, D. Hanstorp, J. Sandström, A. Ehlerding, M. Larsson, G.F. Collins, D.J. Pegg, H. Danared, A Källberg and A. Le Padellec "Electron-impact detachment of Cl⁻" Phys. Rev. A, 68, 012712/1-8, (2003)

2002

- 8) D. Rayane, I. Compagnon, R. Antoine, M. Broyer, P. Dugourd, P. Labastie, J.M. L'Hermite, A. Le Padellec, G. Durand, F. Calvo, F. Spiegelman and A.R. Allouche "Electric dipole moments and polarizabilities of single excess electron sodium fluoride clusters: Experiment and theory." J. Chem. Phys., 116, 10730-10738 (2002)
- 9) E.A Naji, T. Nzeyimana, X. Urbain and A. Le Padellec "Merged beam study of the associative ionisation O⁻+D⁺/O⁺⁺D⁻ and C⁺⁺D⁻" J. Phys. B, 35, 4325-4334, (2002)
- 10) A.Le Padellec, G.F. Collins, H. Danared, A. Källberg, F. Hellberg, K. Andersson, D. Hanstorp and M. Larsson "Relative cross sections for the Electron Impact Single Detachment on Li-" J. Phys. B, 35, 3669-3676, (2002)

3.5.2. Section de livre

F. Calvo, P. Labastie, Chapitre III Thermodynamique et transition solide-liquide du livre *Nanosciences*, tome 2 : *Nanomatériaux*, à paraître début 2006 aux éditions Belin, eds. M. Lahmani et Ph. Houdy.

3.5.2. Actes de conférences à comité de lecture

1) V. Blanchet, J.-M. L'Hermite, A. Le Padellec, B. Lamory, P. Labastie "*Vibrational relaxation of photoexcited Na_3F* ", in "Ultrafast Molecular Events in Chemistry and Biology", Martin, M. M., Hynes, J. T. Eds, Elsevier, p 57-61 (2004)

2) P. Labastie "*Phase Transitions in Free Clusters*", proceedings of the Condensed Matter Theory 27 conference, ed. M. Dinh and M. Belkacem, Nova Science (2005)

3.5.3. Conférences invitées

P. Labastie, Condensed Matter Theory (sep. 15-20 2003, Toulouse, France), "*Phase Transitions in Free Clusters*".

3.5.4. Conférences

1) J.-M. L'Hermite, V. Blanchet, A. Le Padellec, P. Labastie, Femtochemistry VI (juillet 2003, Paris) « *Vibrational relaxation of photoexcited Na_3F* » **poster et actes publiés**

2) J.-M. L'Hermite, V. Blanchet, A. Le Padellec, P. Labastie, Coloq 8 (septembre 2003, Toulouse), « *Vibrational relaxation of photoexcited Na_3F* » **poster et actes publiés**

3) J.-M. L'Hermite, A. Le Padellec, P. Labastie, "Ice, Soot and Aviation : what Impact on Environment ?" (may 10-14 2004, La Londe Les Maures, France), « *A Molecular approach of ice nucleation* », **poster**

4) P. Labastie, TAMC4 (april 24-28 2004, Toulouse, France) « *Geometrical constraints for the minimization of Pair Potentials* », **poster**

4. Optique pour les Tests Fondamentaux

4.1. Composition de l'équipe

Responsables : Carlo Rizzo et Jacques Vigué

Permanents :

Matthias Büchner (CR1 CNRS)
 Cécile Robilliard (CR1 CNRS)
 Carlo Rizzo (PR Université P. Sabatier)
 Gérard Tréneç (IR, à temps partiel dans l'équipe)
 Jacques Vigué (DR1 CNRS)

ATER, post-docs :

M./Mme	Prénom	Nom	Financement	Arrivée	Départ
M.	Bruno	Viaris de Lesegno	ATER Univ. P. Sabatier	1/10/2001	28/02/2002
M.	Alain	Miffre	ATER Univ. P. Sabatier	1/11/2004	31/08/2005
M.	Arnaud	Dupays	UPS Coll. Equipe théorique	Voir équipe théorique	Voir équipe théorique
M.	Fernando	Brandi	Bourse Marie Curie, CE	19/12/2005	18/12/2007

Doctorants :

M./Mme	Prénom	Nom	Financement	Arrivée	Départ
M.	Rémi	Delhuile	Moniteur MENRT	1/10/1999	30/09/2002
M.	Arnaud	Dupays	Bourse MENRT co-direction A.Beswick	Voir équipe théorique	Voir équipe théorique
M.	Alain	Miffre	Bourse MENRT	1/09/2001	30/08/2004
Mme	Marion	Jacquey	Bourse MENRT	1/09/2003	30/08/2006
M.	Benoît	Pinto da Souza	Bourse MENRT/moniteur	1/09/2005	30/08/2008

Visiteurs :

M./Mn	Prénom	Nom	Université	Financement	Arrivée	Départ
M.	Dimitar	Bakalov	Ac. des Scienc Bulgarie	OTAN et CNRS	Voir équipe théorique	Voir équipe théorique
M.	Gabriel	Bialolenker	NRCN, Israël	Poste rouge CNRS	30/08/2004	29/05/2005

Stagiaires (maîtrise, magistère, DEA, Ecoles, autres) :

M./Mn	Prénom	Nom	Université/Ecole	Niveau	Arrivée	Départ
M.	Thomas	Nirrengarten	ENS Ulm Paris	Magistère	01/07/2002	31/07/2002
M.	Pierre	Genest	UPS	Licence	01/07/2002	31/07/2002
M.	Laurent	Lombez	UPS	Licence	01/07/2002	31/07/2002
M.	Olivier	Alzina	Ecole Ingénieur	Strasbourg 1 ^{ère}	01/07/2002	31/07/2002
M.	Bruno	Aymes	UPS	Maîtrise	01/04/2002	30/06/2002
M.	Bertrand	Blondy	INSA Toulouse	4 ^{ème} année	01/05/2002	31/07/2002
Mme	Marion	Jacquey	UPS	DEA	01/03/2003	30/06/2003
M.	Pierre	Genest	UPS	Maîtrise	01/04/2003	30/06/2003
M.	Laurent	Lombez	UPS	Maîtrise	01/04/2003	30/06/2003
M.	Damien	Sola	Lycée Morez	BTS	01/04/2003	31/07/2003
M.	Guilhem	Dif-Pradalier	Ecole Sup Aéro	1 ^{ère} année	01/07/2003	31/07/2003
Mme	Laura	Lazar	UPS Erasmus	Maîtrise	01/04/2004	30/06/2004
M.	Julien	Favier	BTS Optique Morez	1 ^{ère} année	01/05/2004	31/07/2004

M.	Benoît	Pinto da Souza	UPS Toulouse	Maîtrise	01/04/2004	30/06/2004
M.	Franck	Bielsa	UPS Toulouse	DEA	01/03/2004	30/06/2004
M.	Hycham	Belyamoun	Ecole Sup Aéro	PIR	01/04/2004	30/06/2004
M.	Ludovic	Arnaud	UPS	Master I	01/04/2005	30/06/2005
M.	Claus	Schmitzer	UPS Erasmus	Master I	01/04/2005	30/06/2005
Mme	Christelle	Escure	UPS Toulouse	Master I	04/2005	06/2005
M.	Benoît	Pinto da Souza	UPS Toulouse	Master II	03/2005	06/2005
Mme	Anne-Sophie	Plessis	Lycée Morez	BTS	23/05/2005	30/06/2005

4.2. Compte-rendu de l'activité scientifique du 01/01/2002 au 31/07/05

4.2.1. Introduction : les activités du l'équipe

Notre groupe travaille sur deux thèmes de recherche fondamentale du domaine de l'optique, l'interférométrie atomique et la mesure de la biréfringence magnétique du vide. Avant de détailler leur contenu, nous tenons à souligner qu'il y a une réelle cohérence scientifique entre ces deux thèmes et nous entretenons des échanges qui vont bien au-delà de considérations techniques. Pour ne citer qu'un seul exemple, la propagation de la lumière ou des atomes est modifiée par la présence de champs électriques et magnétiques : l'effet Kerr pour la lumière est l'analogue de l'effet de polarisabilité électrique pour les ondes atomiques et l'effet de propagation non réciproque en champs électrique et magnétique croisés existe aussi bien pour la lumière que pour les des ondes atomiques et nous cherchons à le mettre en évidence dans les deux cas.

- L'interférométrie atomique, sous la responsabilité de Jacques Vigué.

Nous avons construit un interféromètre atomique de Mach-Zehnder utilisant des atomes de lithium aux énergies thermiques. Dans cet interféromètre, les miroirs et séparatrices pour les atomes utilisent la diffraction atomique sur des ondes laser stationnaires quasi-résonantes à une longueur d'onde de 671 nm. Les franges d'interférences ont une excellente visibilité, atteignant 84,5% et les deux chemins suivis par l'atome à l'intérieur de l'appareil sont séparés de 100 micromètres, quand on utilise le premier ordre de diffraction. Une mesure interférométrique de la polarisabilité électrique du lithium vient d'être réalisée en appliquant un champ électrique sur un seul des chemins atomiques.

- La mesure de la biréfringence magnétique du vide, sous la responsabilité de Carlo Rizzo.

L'électrodynamique quantique prévoit que le vide est un milieu biréfringent en présence d'un champ magnétique. Notre but est de mesurer cette biréfringence à l'aide d'un appareil de mesure de très faibles ellipticités et d'un champ magnétique pulsé intense. L'expérience consiste à mesurer l'ellipticité acquise par un faisceau laser initialement polarisé linéairement après sa propagation dans une cavité optique de très grande finesse, plongée dans un champ magnétique transverse. La construction d'un aimant pulsé adapté se fait au Laboratoire National des Champs Magnétiques Pulsés de Toulouse, et un prototype a été testé jusqu'à plus de 13 Tesla. Au LCAR, nous caractérisons une cavité Fabry-Pérot de finesse très élevée et de longueur 3,6 mètres. Les miroirs de la cavité sont réalisés par le Laboratoire MA-VIRGO de l'IN2P3 à Lyon. Dans l'expérience finale, qui sera montée au LNCMP, cette cavité permettra d'obtenir un chemin optique d'environ 1000 km dans le champ magnétique ! Nous avons aussi développé des cavités plus courtes que nous avons utilisées pour les tests du système d'asservissement du laser et pour des premières mesures de faibles biréfringences avec notre appareil. Cela nous a permis de mesurer l'effet Kerr de l'oxygène moléculaire avec une sensibilité en indice de réfraction de environ $2 \times 10^{-15} \text{ Hz}^{-1/2}$.

Nous allons exposer séparément les développements et les projets concernant ces deux activités.

4.2.2. Interférométrie atomique : travaux effectués

Nous allons décrire tout d'abord notre interféromètre atomique et ses performances, puis les principaux résultats obtenus. Nous décrirons ensuite les développements techniques que nous avons entrepris (construction d'un laser puissant à milieu amplificateur solide à 671 nm et développement d'aimants pour rotateur de Faraday). Nous décrirons ensuite nos projets, qui comportent deux volets principaux : réalisation de mesures originales en interférométrie atomique et amélioration de notre interféromètre atomique.

4.2.2.1. Description générale de notre interféromètre atomique

Notre équipe a construit un interféromètre atomique fonctionnant avec l'atome de lithium aux énergies thermiques et utilisant la diffraction sur des ondes stationnaires laser quasi-résonnantes à 671 nm. Cette construction a commencé en 1998 et nous avons obtenu de premiers signaux en 2001. Une panne grave (inondation de toutes les chambres à vide) suivie d'une longue série de pannes ne nous a pas permis de travailler dans de bonnes conditions jusqu'à la fin de 2003.

Notre interféromètre est un interféromètre de Mach-Zehnder à 3 réseaux (voir figure 1) : sa conception a été fortement influencée par celui de D. Pritchard²³ et par celui de Siu Au Lee²⁴. Nous avons choisi ce qui nous a semblé le meilleur de chacun de ces deux appareils : grande taille et utilisation d'un alcalin chez D. Pritchard, diffraction laser dans le régime de Bragg chez S. A. Lee. La diffraction laser fixe le pas du réseau qui est égal à la demi-longueur d'onde de résonance de l'atome. Le choix du lithium s'est imposé pour permettre un angle de diffraction suffisant pour pouvoir séparer physiquement les deux faisceaux qui interfèrent. Nous avons aussi réalisé des améliorations importantes, par exemple du point de vue de la stabilité de l'interféromètre, ce qui est très important pour les expériences car ces interféromètres ont une très grande sensibilité aux vibrations.

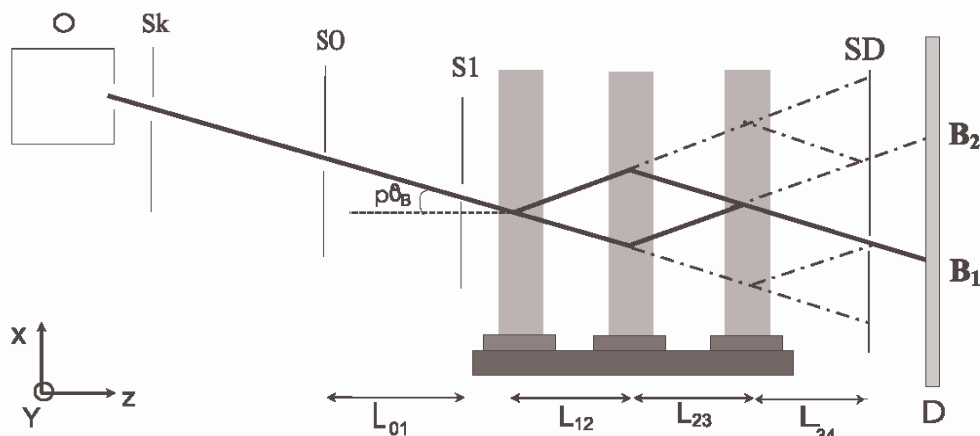


Figure 1 : Schéma de notre interféromètre atomique : un faisceau supersonique de lithium ensemené dans l'argon est collimaté par un écorceur Sk et par deux fentes S0 et S1 de largeurs de l'ordre de 10 à 20 micromètres, séparées par une distance $L_{01} = 760$ mm. Le faisceau est alors diffracté par trois ondes stationnaires laser. Les distances L_{12} et L_{23} sont égales à 605 mm. On a représenté en trait continu les faisceaux

²³ D. W. Keith, C. R. Ekstrom, Q. A. Turchette and D.E. Pritchard, Phys. Rev. Lett. 66, 2693 (1991)

²⁴ D.M. Giltner, R. W. McGowan and Siu Au Lee, Phys. Rev. Lett. 75, 2638 (1995)

atomiques principaux et en trait discontinus les faisceaux parasites. La fente SD, qui est réglable en largeur et en position selon la direction x , sert à sélectionner les atomes qui seront détectés sur le fil chaud de rhénium D : en effet, les deux faisceaux de sortie B1 et B2 transportent des signaux d'interférences complémentaires. La fente de détection permet de travailler sur l'un ou l'autre des deux faisceaux et nous l'avons placée à une distance $L_{34} = 400$ mm de la troisième onde stationnaire laser.

Avec le lithium se propageant à une vitesse voisine de 1065 m/s, la longueur d'onde de de Broglie n'est pas trop petite, $\lambda_{dB} = 54$ picomètres environ. La diffraction sur des ondes stationnaires laser quasi-résonnantes dans le régime de Bragg, déjà utilisée par S. A. Lee avec le néon métastable, permet théoriquement de construire un interféromètre ayant une excellente transmission et des franges de très bonne visibilité, ce que confirme l'expérience.

Pour le lithium, la longueur d'onde λ_L du laser utilisé est très proche de la longueur d'onde de la première raie de résonance du lithium à $\lambda = 671$ nm. Le réseau associé a donc une période de 335 nm et l'angle de diffraction au premier ordre est proche de 170 microradians. Bien que petit, cet angle est suffisant pour permettre une bonne séparation des deux chemins atomiques. Au niveau du deuxième réseau, la séparation entre les deux chemins atteint 100 micromètres, chaque faisceau ayant une largeur voisine de 30 micromètres. Avant nous, pratiquement seule l'équipe de D. Pritchard a pu séparer physiquement les chemins atomiques dans un interféromètre et réaliser ainsi des mesures interférométriques de faibles perturbations appliquées sur un seul des deux chemins. Notons que les mesures d'effets inertiels, du type accéléromètre ou gyromètre, ne nécessitent pas de séparer physiquement les chemins.

Les réseaux de lumière sont simples à produire et, dans le régime de Bragg, l'efficacité de diffraction est réglable entre 0% et 100% par le choix des caractéristiques du faisceau lumineux (densité de puissance, fréquence, diamètre du faisceau). C'est exactement ce que l'on souhaite pour les séparatrices ou les miroirs à atomes nécessaires dans les interféromètres. Les réseaux de lumière semblent présenter des défauts très faibles, qui restent encore à caractériser. Pour les produire dans de bonnes conditions, il faut cependant disposer d'un laser monofréquence assez intense (puissance de quelques centaines de milliwatts au moins dans notre cas expérimental) et de fréquence réglable proche de celle de la résonance atomique, avec un écart à résonance typique de l'ordre de quelques GHz.

4.2.2.2. Détection des atomes de lithium en sortie de l'interféromètre

Personnel impliqué: RD; AM; MB; GT; JV, collaboration avec H. J. Loesch (université de Bielefeld en Allemagne) et J. P. Gauyacq (LCAM, université d'Orsay).

Référence: [3]

Nous détectons le signal de sortie de l'interféromètre par ionisation de surface sur un d'un fil chaud de rhénium (détecteur de Langmuir-Taylor) : ce détecteur est bien adapté à la détection d'atomes alcalins aux énergies thermiques et il a pour le lithium une efficacité voisine de 30%. Ce détecteur nous permet de travailler dans de bonnes conditions, bien que le bruit de ce détecteur soit légèrement sur-Poissonnien.

4.2.2.3. Performances de notre interféromètre atomique

Personnel impliqué : RD ; AM ; MJ ; MB ; GT ; JV

Références [4, 18, 23]

Notre interféromètre a été construit pour permettre la mesure de petites perturbations et nous soulignerons ici seulement quelques performances essentielles :

a) les interférences observées ont une excellente visibilité V qui est définie par :

$$V = (I_{\max} - I_{\min}) / (I_{\max} + I_{\min})$$

La visibilité atteint $V = 84,5 \pm 1 \%$ quand on utilise la diffraction au premier ordre. La figure 1 montre un exemple des signaux obtenus. Aucun interféromètre atomique avec des chemins atomiques bien séparés dans l'espace n'a atteint une telle valeur de la visibilité.

b) nous avons aussi pu observer des signaux d'interférences de qualité en utilisant la diffraction au deuxième ordre de diffraction (visibilité $V = 54\%$) et au troisième ordre (visibilité $V = 26\%$)

c) le lithium naturel contient 92,4 % de ${}^7\text{Li}$ et 7,6 % de l'autre isotope ${}^6\text{Li}$. Toutes les courbes présentées ici montrent des résultats avec l'isotope le plus abondant mais nous avons pu faire fonctionner de manière sélective notre interféromètre avec chacun de ces deux isotopes, en utilisant le déplacement isotopique de la raie de résonance, voisin de 10 GHz. Nous avons utilisé du lithium naturel et, pour travailler sur le lithium ${}^7\text{Li}$, le laser créant les ondes stationnaires est accordé à environ 3 GHz au dessus de la transition ${}^2\text{S}_{1/2} - {}^2\text{P}_{3/2}$ du ${}^7\text{Li}$: l'écart à résonance avec la transition la plus proche du ${}^6\text{Li}$ est alors proche de 13 GHz et la probabilité de diffraction est négligeable pour cet isotope. Pour travailler avec le lithium ${}^6\text{Li}$, le laser créant les ondes stationnaires est accordé à environ 3 GHz au dessous de la transition ${}^2\text{S}_{1/2} - {}^2\text{P}_{1/2}$ du ${}^6\text{Li}$ et l'écart à résonance avec la transition la plus proche du ${}^7\text{Li}$ est aussi de l'ordre de 13 GHz. Dans le cas du ${}^6\text{Li}$, les signaux d'interférence utilisant le premier ordre de diffraction ont une visibilité $V = 55\%$.

d) nous avons étudié l'effet des défauts d'alignement sur la visibilité des franges d'interférences et nous avons pu vérifier que la théorie²⁵ développée avec C. Champenois en 1999 explique bien les variations de la visibilité avec ces défauts.

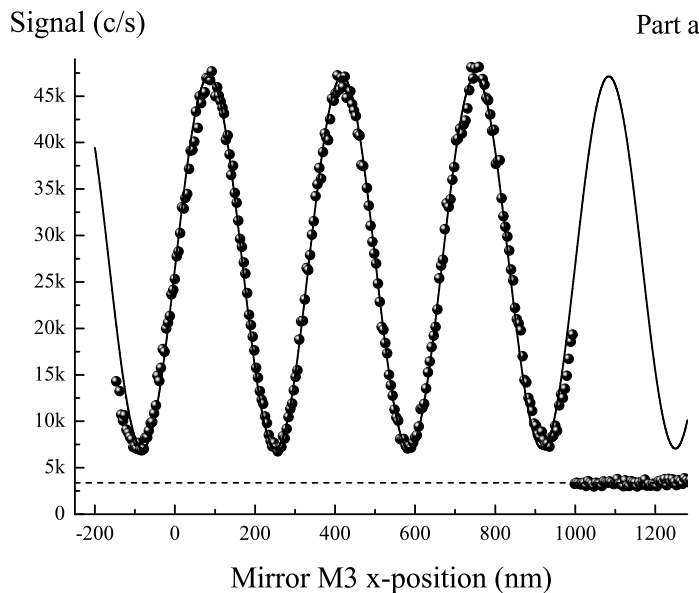


Figure 2 : franges d'interférences atomiques observées en utilisant le premier ordre de diffraction. Ces franges sont enregistrées en déplaçant un miroir d'une des ondes stationnaires. Chaque point de mesure correspond à un temps de comptage de 0,1 seconde mais les signaux sont exprimés en nombres d'atomes détectés par seconde).

²⁵ C. Champenois, M. Büchner and J. Vigué, Eur. Phys. J. **D 5**, 363-374 (1999)

4.2.2.4. Perturbation des signaux d'interférence par un gradient de champ magnétique

Personnel impliqué : AM ; MJ ; MB ; GT ; JV

Référence: [22]

Nous avons appliqué un gradient transverse de champ magnétique ce qui introduit des déphasages fonction de F et de M_F essentiellement dus à l'effet Zeeman linéaire. Ces déphasages induisent une baisse de la visibilité suivie de récurrences. La figure 3 montre la visibilité et le déphasage en fonction du courant de la bobine créant le gradient de champ. Pour cette expérience, nous avons préparé un seul état hyperfin de ${}^7\text{Li}$ (${}^2\text{S}_{1/2}$, $F=1$) par pompage optique.

Comme le montre la figure 3, ces récurrences sont de moins en moins intenses à cause de la moyenne sur la distribution de vitesse des atomes, alors qu'elles auraient toutes la même valeur maximale si la distribution de vitesse était infiniment étroite. Pour des forts courants, la contribution des sous-niveaux Zeeman $M_F = \pm 1$ au signal d'interférences est rendue négligeable par la moyenne sur les vitesses et seuls les atomes dans le sous-niveau $M_F = 0$ contribuent, ce qui fait que la visibilité est réduite à $1/3$ de sa valeur en l'absence de gradient de champ.

Le déphasage mesuré présente des sauts de π pour des courants assez faibles correspondant à des inversions du contraste, et une dérive sensiblement quadratique pour les courants plus forts : cette dérive s'explique bien par l'effet Zeeman quadratique dû au découplage hyperfin.

Nous avons effectué des mesures avec les deux isotopes et ces mesures sont en bon accord avec leur description théorique. Elles nous donnent divers renseignements intéressants (sensibilité des mesures de phase, sélectivité isotopique de notre interféromètre, dispersion de vitesse des atomes contribuant au signal d'interférences).

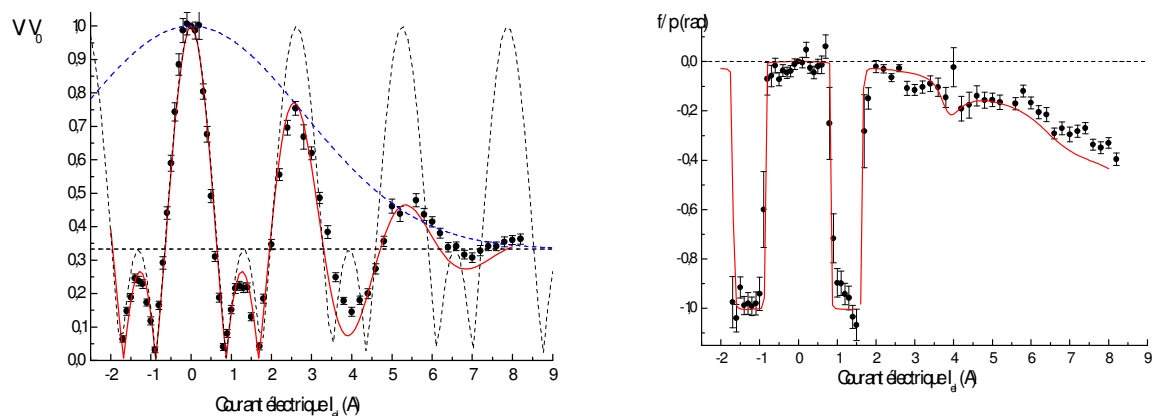


Figure 3 : visibilité (partie gauche) et déphasage (partie droite) en fonction du courant créant le gradient de champ magnétique. Les points sont expérimentaux et les courbes sont les résultats théoriques. La visibilité V présente des récurrences, dont l'amplitude diminue rapidement à cause de la moyenne sur la distribution de vitesse des atomes. La phase présente des sauts de π quand le contraste s'inverse et une dérive quadratique avec le courant due à l'effet Zeeman non linéaire du niveau $M_F=0$.

4.2.2.5. Mesure par interférométrie atomique de la polarisabilité électrique de l'atome de lithium ^7Li

Personnel impliqué : AM ; MJ ; MB ; GT ; JV

Références [19, 20]

Nous avons développé un condensateur avec une électrode suffisamment mince pour pouvoir l'insérer entre les deux faisceaux atomiques dans l'interféromètre (un « septum » selon la terminologie introduite par D. Pritchard). Nous avons pu effectuer ainsi une mesure de polarisabilité électrique du lithium. Avec le condensateur en place, nous avons des signaux d'interférences aussi beaux qu'en son absence (c'est à dire sans perte de flux et avec une visibilité de 84%). Nous avons optimisé la sensibilité en phase de notre interféromètre en ouvrant légèrement plus les fentes réglables S1 à 18 micromètres et SD à 50 micromètres : le flux moyen a alors atteint 10^5 atomes détectés par seconde et la visibilité a été un peu réduite à 62%. En appliquant un champ électrique sur un des deux chemins atomiques, nous observons un déphasage.

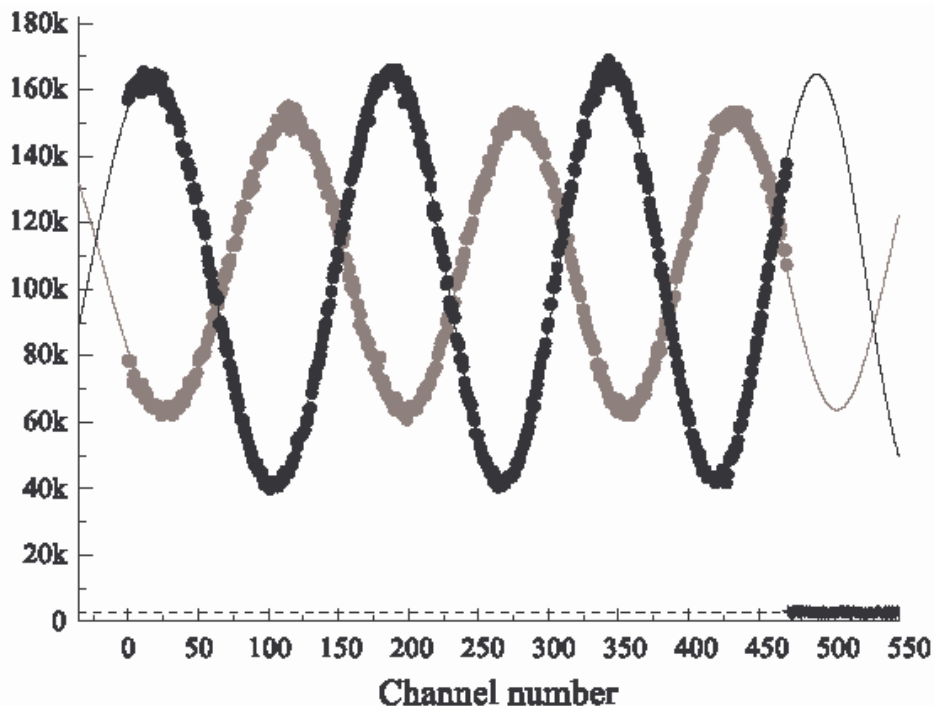


Figure 4 : exemples de signaux d'interférence atomique enregistrés avec un champ électrique nul (points noirs) et avec un champ électrique non nul (points gris) montrant le déphasage induit par la polarisabilité (en fait le déphasage est voisin de 3π). Chaque point de mesure correspond à un temps de comptage de 0,36 seconde. Les courbes représentent les meilleurs ajustements. La perte de contraste est due au fait que le déphasage résultant de l'application du champ électrique dépend de la vitesse v des atomes, comme $1/v$, et que notre jet atomique a une dispersion de vitesse non négligeable.

Nous arrivons à mesurer la phase d'un enregistrement avec une excellente précision voisine de 3 milliradians, mais notre précision finale est nettement moins bonne, à cause de petites oscillations lentes de la phase des enregistrements en champ électrique nul. Nous avons fait 44 enregistrements en alternant un enregistrement en champ nul et un en champ électrique non nul, la tension croissant par pas de 20 volts environ. La phase des enregistrements effectués en champ électrique nul dérive d'environ $7,5 \pm 0,2$ milliradians/minute, ce qui n'est pas gênant, et s'explique très bien par des effets thermiques.

Nous avons mesuré la température de la barre supportant les trois miroirs des ondes stationnaires qui dérivait de $1,17 \times 10^{-3}$ K/minute durant cette expérience et cette valeur explique bien la dérive de phase observée. Mais, en plus de cette dérive, la phase présente des oscillations de période voisine de 17 minutes autour de cette dérive et nous ignorons ce qui en est la cause.

Malgré ces difficultés, nos mesures sont très cohérentes, puisque la loi qui relie le déphasage au carré de la tension appliquée V sur le condensateur est très bien vérifiée, à condition de prendre en compte la moyenne sur les vitesses. Nous obtenons la constante de proportionnalité entre la phase ϕ_m correspondant à la vitesse atomique la plus probable notée u :

$$\phi_m / V^2 = (1.3870 \pm 0.0010) \times 10^{-4} \text{ rad/V}^2$$

avec une incertitude relative de seulement $7,2 \times 10^{-4}$.

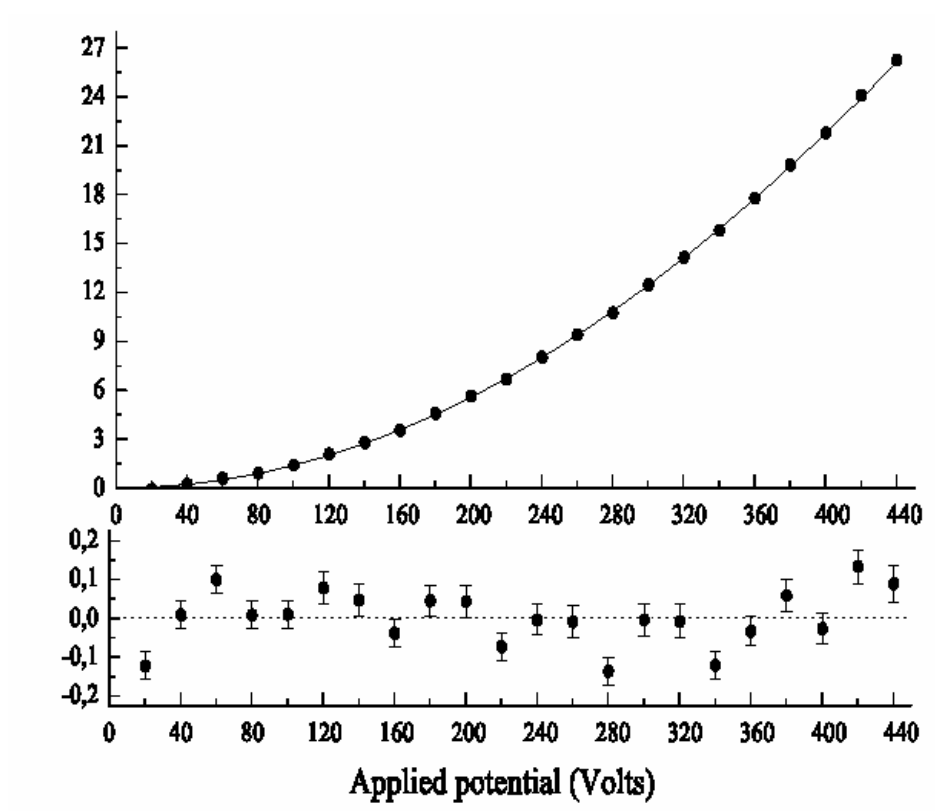


Figure 5 : Le déphasage mesuré (points) est tracé en fonction de la tension appliquée sur le condensateur. La courbe est le meilleur ajustement théorique, tenant compte la moyenne sur la distribution de vitesse des atomes. Les résidus de cet ajustement sont tracés avec une échelle étendue sur le graphe inférieur.

Le champ électrique dans notre condensateur est calculable analytiquement et nous avons pris soin de réaliser une construction suffisamment précise pour que les incertitudes relatives sur les dimensions soient de l'ordre de 1 à 2 pour mille.

La quantité la plus mal connue est la vitesse moyenne u des atomes et nous avons fait deux mesures, une par effet Doppler, l'autre par diffraction atomique, et elles sont en très bon accord : $u = 1065,7 \pm 5,8$ m/s.

Nous déduisons de ces mesures la polarisabilité électrique du lithium $\alpha = (24.33 \pm 0.16) \times 10^{-30} \text{ m}^3 = 164.19 \pm 1.08$ unités atomiques, avec une incertitude finale de 0.66% due

pour l'essentiel à l'incertitude (0.54%) sur la mesure de la vitesse des atomes de lithium. Le tableau ci-dessous compare notre mesure aux meilleures valeurs de la littérature et l'accord est excellent. Nous avons indiqué pour information la valeur Hartree-Fock ²⁶ car elle permet d'observer l'importance des effets de corrélation électronique : ces effets diminuent la valeur de la polarisabilité α de 3,5%. Il faut noter que les calculs très précis de Kassimi et Takkar ⁴ comme ceux de Yan et al. ²⁷ donnent des résultats en très bon accord, malgré la différence de méthode. Ces calculs négligent encore deux petites corrections : les effets relativistes qui, d'après la référence ²⁸, diminuent la polarisabilité α d'environ 0.06 unités atomiques et les effets de masse finie du noyau qui, dans la limite hydrogénoïde, auraient pour effet d'augmenter α d'environ 0.04 unités atomiques

Mesure ou calcul	Valeur de la polarisabilité α (m ³)	Valeur de la polarisabilité α (unités atomiques)
B. Bederson et coll. ²⁹ (mesure, 1974)	$(24.3 \pm 0.5) \times 10^{-30}$	
Notre mesure (2005)	$(24.33 \pm 0.16) \times 10^{-30}$	164.19 ± 1.08
Kassimi and Thakkar ⁴ , valeur Hartree-Fock (1994)		169.946
Kassimi and Thakkar ⁴ , valeur extrapolée de calculs MP2, MP3 et MP4 (1994)		164.2 ± 0.1
Yan et coll. ⁵ , calcul de type Hylleraas (1996)		164.111 ± 0.002

4.2.2.6. Propriétés des jets supersoniques

Personnel impliqué : AM ; MJ ; MB ; GT ; JV ; collaboration avec l'équipe Théorie du LCAR et le LPQ

Références [1,13,17]

Notre connaissance des jets supersoniques nous a servis pour un travail en collaboration sur les jets d'iode moléculaire ensemencés dans l'argon.

D'autre part, en 2003, dans le cadre de nos expériences d'interférométrie atomique, nous avons mesuré la température parallèle de notre jet de lithium ensemencé dans l'argon et nous avons trouvé une température sensiblement 3 fois plus petite que la température parallèle de l'argon, température calculée par une loi semi-empirique qui est sûrement assez précise (en comparant des données variées, nous estimons l'incertitude relative sur la température parallèle à environ 14%). La littérature contient des résultats théoriques ou expérimentaux montrant que les températures parallèles du gaz porteur et de l'espèce ensemencée ne sont pas égales, mais les études portent en général sur le cas d'un gaz lourd dilué dans un gaz porteur léger et, dans ce cas, le gaz porteur est toujours plus froid que le gaz ensemencé.

En faisant des hypothèses simplificatrices bien adaptées à notre cas (gaz léger ensemencé dans un gaz porteur plus lourd, très forte dilution du gaz léger), nous avons pu établir des équations analytiques pour décrire les températures parallèles et perpendiculaires

²⁶ N. E. Kassimi and A. J. Thakkar, Phys. Rev. A 50, 2948 (1994)

²⁷ Z. C. Yan, J. F. Babb, A. Dalgarno and G. W. F. Drake, Phys. Rev. A 54, 2824 (1996)

²⁸ I. S. Lim, M. Pernpointner, M. Seth, J. K. Laerdahl, P. Schwerdtfeger, P. Neogady and M. Urban, Phys. Rev. A 60, 2822 (1999)

²⁹ R. W. Molof, H. L. Schwartz, T. M. Miller and B. Bederson, Phys. Rev. A 10, 1131 (1974)

de deux espèces dans un écoulement supersonique et leur intégration a donné un résultat théorique en très bon accord avec notre expérience. De plus, notre théorie relie l'effet au rapport des masses des deux atomes et à des rapports de sections efficaces (qui elles-mêmes ne dépendent que des potentiels à longue distance pour les paires d'atomes formées soit de deux atomes du gaz porteur, soit d'un atome du gaz porteur et d'un atome du gaz ensemencé).

L'effet s'explique simplement : dans une expansion supersonique d'un gaz pur, le refroidissement provient du mouvement transverse qui est refroidi par un effet « géométrique » et les collisions, en couplant les mouvements longitudinal et transverse, induisent un refroidissement du mouvement parallèle, qui cesse au moment où les collisions deviennent trop rares, alors que la température perpendiculaire continue à décroître. Pour un gaz ensemencé très dilué, le refroidissement de l'atome ensemencé provient du couplage des mouvements de cet atome à ceux du gaz porteur. Dans une collision d'un atome léger sur un atome lourd, la vitesse de l'atome léger perd son orientation ce qui couple fortement les mouvements transverse et longitudinal. On constate donc que les températures parallèle et perpendiculaire de l'atome léger restent couplées à celles du gaz porteur alors que celles du gaz porteur se sont déjà découplées l'une de l'autre.

4.2.2.7. Test de la neutralité électrique des atomes par interférométrie atomique

Personnel impliqué : RD ; AM ; MJ ; MB ; GT ; JV ; collaboration avec l'équipe de J. P. Toennies au MPI für Stromungsforschung à Göttingen

Nous avons aussi proposé une application originale de l'interférométrie atomique, pour tester la neutralité électrique des atomes³⁰. Nous avons montré que la sensibilité ultime actuelle est voisine de 10^{-17} fois la charge électrique de l'électron avec un jet thermique et que l'on peut espérer gagner 3 ou 4 ordres de grandeur avec un jet atomique ralenti.

Avec le soutien de PROCOPE, nous avons établi une collaboration avec J. P. Toennies au MPI à Göttingen pour faire une première mesure sur son interféromètre atomique utilisant l'atome d'hélium. nous avons construit un condensateur haute tension adapté à l'interféromètre de Göttingen et remis en état de marche des alimentations + 20 kV et -20 kV que nous avons utilisées pour des expériences sur des molécules. Marion Jacquy a passé deux mois fin 2004 et début 2005 à Göttingen pour des essais mais l'interféromètre atomique avait été modifié depuis sa dernière utilisation en 2003. Les asservissements de la suspension anti-vibration n'ont pas fonctionné et il n'a pas été possible d'obtenir de signal.

Comme J. P. Toennies arrête totalement son activité, cette collaboration est définitivement arrêtée. Nous essaierons peut-être une expérience à Toulouse sur le lithium, mais la polarisabilité électrique du lithium est égale à plus de 100 fois celle de l'hélium et, avec le lithium, les erreurs systématiques liées à la polarisabilité seront beaucoup plus difficiles à éliminer.

³⁰ C. Champenois et al., Workshop Hydrogen Atom II, S. G. Karshenboim, F. Pavone, F. Bassani, T. W. Hänsch, M. Inguscio ed., Springer Lecture Notes in Physics p 554 (2001) ; R. Delhulle et al., Quantum Electrodynamics and the Physics of the Vacuum, QED 2000, AIP Conference Proceedings 564, G. Cantatore ed., p 192-199 (2001)

4.2.2.8. Développement d'un laser à milieu amplificateur solide à 671 nm.

Personnel impliqué : GT ; JV ; collaboration avec P. Juncar (INM-BNM au CNAM à Paris) et F. Balembois du LCF de IOTA à Orsay.

Notre expérience d'interférométrie atomique avec l'atome de lithium utilise un laser monofréquence à une longueur d'onde très proche de la longueur d'onde de résonance du lithium à 671 nm et il nous faut une assez forte puissance laser, de l'ordre du Watt. A cette longueur d'onde, il n'existe pas de laser monofréquence de cette puissance, si on excepte les lasers à colorants. Les amplificateurs diodes lasers de type MOPA qui émettait environ 0,5 Watt ne sont plus produits pour la longueur d'onde 671 nm.

Le principe du laser en construction est d'utiliser comme milieu amplificateur l'ion néodyme dans la matrice YVO_4 ou GdVO_4 et de le pomper par une diode laser à 808 nm. La cavité est une cavité en anneau avec une diode optique permettant un fonctionnement unidirectionnel et monofréquence à forte puissance. Ce laser émettant 1342 nm est doublé intracavité par un cristal doubleur de LBO pour produire le rayonnement à 671 nm. Ce laser est donc totalement analogue des lasers VERDI de la firme COHERENT émettant un rayonnement monofréquence à 532 nm, avec une forte puissance, jusqu'à 18 Watt : même pompage à 808 nm, même cristal Nd : YVO_4 , même principe de doublage intracavité dans un cristal de LBO. La différence principale est le niveau final de la transition laser de l'ion néodyme : dans les deux cas le pompage optique crée une inversion de population du niveau supérieur $^4\text{F}_{3/2}$ vers des sous niveaux de l'état fondamental ^4I . Pour un laser à 1064 nm, on utilise la transition vers des sous niveaux du $^4\text{I}_{11/2}$ alors que pour un laser à 1342 nm, on utilise la transition du même niveau $^4\text{F}_{3/2}$ vers des sous niveaux du $^4\text{I}_{13/2}$ et cette dernière transition est nettement moins intense. La perte de Stokes est évidemment plus forte en émettant un photon à 1342 nm qu'en émettant un photon à 1064 nm, le cristal étant pompé à 808 nm, et le rendement en puissance sera inférieur.

Fin 2003, nous avons étudié la bibliographie et nous avons eu des discussions avec F. Balembois du Laboratoire Charles Fabry de l'Institut d'Optique et avec le groupe de P. Juncar au BNM-INM au CNAM qui développent ensemble un laser assez semblable mais à des longueurs d'onde différentes (1320 nm et à 660 nm) donc avec un cristal différent. Nous avons réuni environ 60 kEuros TTC de financement venant de notre laboratoire, du BQR de l'université P. Sabatier, de l'IRSAMC, d'un contrat BNM et du CNRS SPM pour développer ce laser (l'essentiel de ces crédits a été reçu en 2004 et début 2005).

Nous avons analysé théoriquement comment fonctionne ce genre de laser et nous avons aussi fait de nombreux essais. Nous avons testé des cristaux de YVO_4 et GdVO_4 dopés au néodyme avec des taux de dopage de 0.1 à 0.3% ainsi que des cavités de formes différentes. Nous avons obtenu un bon fonctionnement du laser à 1342 nm (avec jusqu'à 6 Watt de puissance pour 20 Watt de pompe à 808 nm). Nous avons obtenu aussi un fonctionnement unidirectionnel, mais seulement à faible puissance, avec une diode optique formée d'un cristal de GGG plongé dans un champ magnétique. Après avoir mesuré la constante de Verdet à 1342 nm du GGG et du TGG et avoir obtenu des informations sur l'absorption optique du TGG, nous avons commandé de nouveaux composants pour cette diode optique (des barreaux de GGG de 20 mm de longueur, des barreaux de TGG de 10 mm de longueur) que nous allons bientôt tester. Nous avons construit un aimant adapté donnant un champ au centre de 1.1 Tesla et une intégrale de champ sur 10 mm proche de 0.011 Tesla.m et sur 20 mm proche de 0.019 Tesla.m, qui devrait donner des rotations Faraday tout à fait suffisantes.

Enfin, nous avons fait des essais de doublage de fréquence intra-cavité avec un cristal de LBO et nous avons obtenu jusqu'à plusieurs centaines de milliwatts de puissance à 671

nm. Cette construction laser est donc bien avancée et l'ensemble des résultats de la littérature comme ceux de nos essais nous laissent espérer un très bon fonctionnement.

4.2.2.9. Développement d'aimants pour rotateur de Faraday et diodes optiques

Personnel impliqué : GT ; JV ; collaboration avec O. Cugat du Laboratoire d'Electrotechnique, INPG/UJF à Grenoble et avec A. Brillet (VIRGO et Observatoire de Nice).

Nous avons entrepris ces développements d'aimants permanents quand l'équipe de P. Juncar nous a dit n'avoir pas réussi à faire fonctionner une diode optique dans son laser à 1320 nm selon le schéma traditionnel, car la rotation Faraday à cette longueur d'onde était trop petite dans le champ disponible (environ 0,88 Tesla). En effet, la constante de l'effet Faraday (la constante de Verdet) décroît sensiblement comme $1/\lambda^2$.

Nous avons pris des contacts avec O. Cugat qui avait développé à Grenoble une « sphère magique » donnant un champ de 5 Tesla dans un très petit volume et nous avons réfléchi à comment adapter cette construction très complexe formé de 214 morceaux d'aimants de forme prismatique aux besoins des rotateurs de Faraday et des diodes optiques. Nous avons trouvé deux arrangements assez simples qui n'utilisent que des objets commerciaux et nous avons déposé en Juin une demande de brevet auprès de la filiale FIST du CNRS qui ne l'a pas soutenue, faute de résultats concrets.

A l'automne 2004, nous avons construit un premier prototype, utilisant l'arrangement le plus simple, qui a donné un champ magnétique de 1,73 Tesla au centre, avec un diamètre libre pour l'optique égal à 10 mm.

Nous avons parlé de ces développements à A. Brillet qui nous a dit être intéressé pour le grand interféromètre VIRGO, car les isolateurs de Faraday produisent un effet de lentille thermique avec la puissance laser actuelle de 20 W et il est projeté de passer assez rapidement à une puissance laser de 200 W : les effets de lentille thermique deviendront très importants et très gênants et un champ magnétique plus intense permet de réduire la longueur du cristal et donc l'effet de lentille thermique. Des aimants donnant un champ plus intense permettraient aussi d'améliorer les rotateurs de Faraday dans tous les domaines où l'absorption optique limite les performances des rotateurs, donc vers l'UV où l'absorption des matériaux est souvent assez forte ou vers l'IR où la constante de Verdet est faible.

En septembre 2004, nous avons demandé de l'aide auprès de la DAE par l'intermédiaire de la DR14 et de son bureau de valorisation pour développer un prototype de la « structure à 3 directions d'aimantations ». Notre dossier a été transmis non à la DAE mais au Département SPM qui nous a accordé en octobre 2004 le budget demandé, soit 10 500 € TTC. Avec ce soutien, nous avons défini un deuxième prototype, avec une « structure à 3 directions d'aimantations ». Une modélisation simple de ce prototype prévoyait un champ voisin de 1,9 Tesla dans un diamètre libre de 22 mm, avec des aimants inclus dans un cylindre de diamètre extérieur 110 mm et de longueur 150 mm environ (les paramètres de ce prototype ont été choisis pour pouvoir servir à construire un isolateur optique pour l'expérience VIRGO) et nous avons construit ce prototype : le champ mesuré au centre est voisin de 1,7 Tesla et la différence avec le modèle provient pour une part des approximations du modèle, qui suppose une géométrie cylindrique parfaite et pour une part d'une petite désaimantation, les nuances de matériau n'ayant peut-être pas les performances annoncées.

Nous allons présenter bientôt une deuxième de demande de brevet auprès de la filiale FIST du CNRS.

4.2.3. Interférométrie atomique : nos projets pour les prochaines années

Notre interféromètre atomique est très performant et, il fait partie des très rares appareils qui permettent de séparer physiquement les deux faisceaux atomiques qui interfèrent. A ce titre, il est maintenant presque sans concurrent dans le monde : l'interféromètre de D. Pritchard à MIT a été transféré vers 2003 chez un de ses anciens élèves, A. Cronin à l'University of Arizona, mais aucune expérience d'interférométrie atomique réalisée après ce transfert n'a été publiée à ce jour. D'autre part, l'interféromètre de J. P. Toennies fonctionnant avec l'hélium (atome ou dimère) est définitivement arrêté. Nous comptons utiliser notre interféromètre atomique pour un ensemble d'expériences variées (dont certaines sont déjà en cours ou en fin de montage) reposant toutes sur cette capacité de séparer physiquement les deux faisceaux atomiques :

- mettre en évidence un effet de propagation non réciproque des ondes atomiques en champs électrique et magnétique croisés
- développer une mesure de la vitesse des atomes par interférométrie atomique et pouvoir ainsi améliorer la mesure de la polarisabilité électrique du lithium
- mesurer l'indice de réfraction des gaz pour les ondes atomiques de lithium
- effectuer des expériences de décohérence par de la lumière résonante et de déphasage par de la lumière non résonante
- rechercher si un atome a une charge électrique non nulle
- utiliser des ordres p de diffraction avec p supérieur à 1 et comprendre la perte de visibilité observée
- mesurer précisément les effets des vibrations sur le signal interférométrique

Nous allons décrire ces projets en commençant par les projets les plus originaux, l'effet de propagation non réciproque des ondes atomiques en champs électrique et magnétique croisés et le développement d'une mesure de la vitesse des atomes par interférométrie atomique, que nous décrirons en détail, et nous donnerons quelques indications plus rapides sur les autres projets.

Pour financer ces projets, nous avons déposé deux demandes de financements :

- en Mars 2005, nous avons organisé un réseau « OPTIQUE ATOMIQUE QUANTIQUE » formé des équipes de F. Vedel à Marseille (PIIM-Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires UMR 6633 CNRS-UAM1) et de R. Kaiser et Ch. Miniatura à l'INLN de Nice (Institut Non Linéaire de Nice, UMR 6618 du CNRS) et de notre équipe, associées à deux PME pour répondre à l'appel d'offres inter-régional de la Région Midi-Pyrénées et de la Région Provence Alpes-Cote d'Azur. La décision de financement sera prise par les deux régions en Octobre. Pour notre équipe, le financement demandé est de 40 000 € TTC par an sur deux années.
- auprès de l'ANR, nous avons déposé un projet intitulé « Nouveaux effets et mesures de précision en interférométrie atomique ». Pour les développements décrits ci-dessous, nous avons estimé le budget global hors salaires à 399 000 € TTC dont 200 000 € TTC demandés à l'ANR, à laquelle nous avons demandé 54 000 € pour financer un stage post-doctoral de 18 mois. Ce projet vient d'être retenu.

4.2.3.1. Effet de propagation d'ondes atomiques en champs électrique et magnétique croisés

Nous allons chercher à mettre en évidence un effet nouveau sur la propagation des ondes atomiques : des travaux théoriques^{31, 32} datant de 1994-1995 prévoient une petite modification du vecteur d'onde atomique \mathbf{k} , en présence de champs électrique et magnétique croisés et orthogonaux à \mathbf{k} : cet effet change de signe avec le sens du trièdre \mathbf{E} , \mathbf{B} , \mathbf{k} donc avec le sens de propagation de l'atome. On peut expliquer simplement cet effet en utilisant le Lagrangien de la référence⁷ :

$$L = m\mathbf{v}^2/2 + \alpha (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})^2 / 2$$

où α est la polarisabilité atomique et le terme important implique le produit mixte $\mathbf{E} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{B})$. Cet effet n'a pas encore été observé, mais sa détection sur un atome neutre est maintenant possible avec notre interféromètre atomique. Nous allons décrire brièvement le montage nécessaire à cette détection.

Pour observer cet effet, l'article³² propose d'insérer un fil perpendiculaire au plan de l'interféromètre et porté à un potentiel élevé entre les deux faisceaux atomiques, avec un champ magnétique \mathbf{B} sensiblement uniforme parallèle à l'axe du fil. Cet arrangement n'est pas utilisable à cause de l'inhomogénéité du champ électrique. En effet, le champ électrique créé par le fil est sensiblement proportionnel à $1/r$ (où r est la distance à l'axe du fil) et le terme de polarisabilité électrique qui est proportionnel au carré du champ électrique va induire un déphasage considérable dépendant rapidement des « paramètres d'impact » des deux faisceaux atomiques par rapport à l'axe du fil. Comme il y a une dispersion de ces paramètres d'impact, la moyenne résultante brouillera totalement les signaux d'interférences atomiques.

Nous proposons donc d'utiliser un condensateur avec « septum » et de créer des champs électriques, dans le plan de l'interféromètre, sensiblement de même module mais de directions opposées de part et d'autre du septum. On pourra égaliser le terme de polarisabilité pour les deux chemins atomiques et il n'y aura donc aucune perte de contraste associée. Le champ magnétique sera toujours perpendiculaire au plan de l'interféromètre et on veillera à éviter tout gradient transverse du module de champ qui déphaserait les divers niveaux Zeeman hyperfins (remarquons que si un petit gradient résiduel est créé, il est possible de le compenser de manière cohérente par un gradient de sens opposé appliqué sur une autre zone de l'interféromètre). Avec des paramètres réalistes (un champ électrique $E = 5 \times 10^5$ V/m appliqué sur une zone de 5 cm de longueur, un champ magnétique B compris entre 10^{-2} et 10^{-1} T), nous prévoyons un déphasage égal allant de 12 à 120 milliradians : la sensibilité de notre interféromètre est très largement suffisante pour détecter un tel déphasage. Enfin, pour distinguer cet effet des déphasages dus à la polarisabilité électrique (donc proportionnel à E^2) ou à l'effet Zeeman (proportionnel au gradient de $|B|$), nous pourrions utiliser les symétries de l'effet et vérifier qu'il change de signe quand on change le sens de \mathbf{E} ou de \mathbf{B} .

4.2.3.2. Mesure de la vitesse des atomes par interférométrie atomique

Le déphasage induit par une perturbation est proportionnel au temps passé dans la perturbation donc inversement proportionnel à la vitesse des atomes dans un interféromètre statique. Pour les mesures de précision, cette dispersion du déphasage pose un gros problème expérimental dès que les atomes n'ont pas une distribution de vitesse très étroite. La visibilité des franges devient très petite si le déphasage moyen est comparable à l'inverse de la largeur

³¹ M. Wilkens, Phys. Rev. Lett. **72**, 5 (1994)

³² H. Wei et al., Phys. Rev. Lett. **75**, 2071 (1995)

relative de la distribution de vitesse : il s'agit de la transposition en interférométrie atomique des effets de cohérence temporelle en interférométrie traditionnelle. De plus, les processus de diffraction sont tous plus ou moins sensibles à la vitesse atomique et, pour éviter tout biais systématique, il faut mesurer non pas la vitesse des atomes entrant dans l'interféromètre mais la vitesse des atomes qui contribuent au signal interférométrique.

L'équipe de D. Pritchard³³ a essayé de résoudre ce problème de plusieurs manières et en particulier de compenser la dispersion de la phase à mesurer $\phi_1(v)$ en ajoutant une phase additionnelle $\phi_2(v)$ qui est aussi une fonction de la vitesse : cette deuxième phase est en fait la somme de deux phases fonctions du temps appliquées en des points différents de l'interféromètre et la dépendance temporelle se transforme en dépendance de la vitesse. Cependant, la manière de produire ces deux phases (par un gradient de champ électrique dans la référence 8) induit aussi une dépendance supplémentaire avec la vitesse v (sensiblement en v^{-2}). Cette technique de compensation a été expérimentée et elle fonctionne très bien au sens où elle permet de travailler avec de très grands déphasages en gardant presque la visibilité initiale. Mais, nous pensons qu'elle ne peut absolument pas servir à une mesure de précision : il semble en effet possible de choisir la fonction $\phi_2(v)$ de manière à compenser la dépendance en v de $\phi_1(v)$ au voisinage d'une vitesse centrale v_0 (qu'il faudra déterminer avec précision ce qui est aussi un problème ouvert), donc d'annuler la dérivée première par rapport à la vitesse de $[\phi_1(v) + \phi_2(v)]$ en v_0 , mais il ne semble pas possible de corriger les termes supérieurs en $(v - v_0)$. La compensation introduira donc une erreur systématique due essentiellement à la valeur moyenne du premier terme non corrigé, le terme du second ordre dont la valeur moyenne est évidemment non nulle.

Si cette proposition de D. Pritchard ne nous semble pas apte à des mesures de grande précision, l'idée d'appliquer un déphasage entre les deux faisceaux qui est une fonction du temps et de l'espace nous semble très fructueuse. On peut penser à deux arrangements principaux :

a) appliquer sur des deux faisceaux atomiques une perturbation sur un créneau spatial de longueur L et qui soit une fonction oscillante du temps de pulsation ω . Le déphasage sera nul pour les atomes de vitesse v telle que $\omega L/v = p$ (2π) (avec p entier). Le signal interférométrique qui est la moyenne sur les instants de passage des différents atomes et sur les vitesses atomiques aura une visibilité maximale quand la condition ci-dessus sera vérifiée pour la vitesse moyenne u . Nous espérons pouvoir réaliser cette expérience avec un champ électrique oscillant dans un condensateur avec septum.

b) une autre configuration consiste à appliquer des perturbations identiques localisées aux points z_1 et z_2 , comme dans la référence³³ mais de manière à créer des déphasages entre les deux faisceaux qui sont des fonctions sinusoïdales du temps. Si le temps de vol de l'atome entre z_1 et z_2 , qui vaut $(z_2 - z_1)/v$, vérifie $\omega (z_2 - z_1)/v = (2p + 1)\pi$, les perturbations se compensent exactement et nous retrouvons une situation analogue. Il est possible de créer des déphasages assez importants entre les deux faisceaux atomiques en utilisant un gradient de champ magnétique. Du point de vue pratique, cette solution est intéressante car elle ne nécessite pas un positionnement d'un septum entre les deux faisceaux. L'inconvénient est que le déphasage induit par un gradient de champ est en $1/v^2$ (un premier $1/v$ facteur provient du temps d'interaction et l'autre facteur de la séparation spatiale des deux faisceaux proportionnelle à l'angle de diffraction, aussi en $1/v$). Cette dépendance assez rapide avec v complique l'analyse.

³³ T. D. Roberts, A. D. Cronin, M. V. Tiberg and D. E. Pritchard, Phys. Rev. Lett. 92, 060405 (2004)

4.2.3.3. Autres projets

Nous comptons utiliser notre interféromètre atomique pour des expériences variées dont certaines sont déjà en cours de montage :

- nous avons fait une première mesure de la polarisabilité électrique du lithium. Comme nous l'avons souligné plus haut, la précision de la mesure interférométrique elle-même est excellente mais le résultat final est obtenu avec une incertitude de 0.66%, dominée par l'incertitude sur la vitesse moyenne des atomes de lithium. Nous souhaitons améliorer cette mesure par une mesure plus précise de cette vitesse et aussi par une construction plus soignée du condensateur.
- nous souhaitons mesurer l'indice de réfraction des gaz pour les ondes atomiques de lithium : une onde atomique traversant un gaz sous basse pression est déphasée et atténuée, ce qui peut s'exprimer par un indice de réfraction dont la partie réelle décrit le déphasage et la partie imaginaire l'atténuation. Pour déterminer l'indice de réfraction d'un gaz pour les ondes atomiques, il faut placer un gaz sur un seul des deux bras de l'interféromètre. Pour cela, on utilise une cellule de gaz comportant de petites ouvertures pour laisser entrer et sortir le faisceau atomique et avec un « septum » formé d'une feuille mince positionnée entre les deux bras de l'interféromètre. On peut ainsi introduire une faible pression de gaz (environ 10^{-3} millibar ou moins) sur un seul de ces deux bras. A ce jour, il existe une seule étude de cet effet, pour les ondes atomiques de sodium et ce travail est aussi dû à l'équipe de D. Pritchard³⁴ : cette équipe n'a extrait de ses mesures que le rapport de la partie réelle de $(n-1)$ sur la partie imaginaire de cette même quantité alors qu'il doit être possible de mesurer ces deux quantités en fonction de la densité du gaz dans la cellule. D'autre part, l'indice d'un gaz pour les ondes atomiques est calculable par la théorie, sans approximations, si on connaît le potentiel d'interaction entre l'atome de l'onde et celui du gaz. Nous avons fait des calculs³⁵ qui montrent que, dans le cas du sodium, l'accord entre mesures et calculs n'est pas très bon, bien que les potentiels sodium-gaz rare soient considérés comme bien connus. Il semble que la sensibilité forte de ces mesures à diverses propriétés de ces potentiels en fasse des tests sévères de la qualité globale de ces potentiels. Indépendamment de l'accord théorie-expérience, les expériences de D. Pritchard⁹ présentent une dispersion étonnante des points expérimentaux. Refaire ces expériences avec soin, dans le cas du lithium, nous semble un test intéressant de la théorie de l'indice et des potentiels lithium-gaz rare.
- expériences de décohérence par de la lumière résonante et de déphasage par de la lumière non résonante : on peut faire une expérience de décohérence en éclairant les atomes de lithium avec une lumière résonnante. La diffusion d'un photon spontanée renseigne sur le chemin suivi par l'atome dans l'interféromètre et cette information, même si elle n'est pas effectivement mesurée, suffit à réduire très fortement la visibilité des interférences atomiques. Des expériences analogues ont déjà été réalisées par l'équipe de D. Pritchard³⁶ sur le sodium. On peut aussi utiliser un faisceau laser focalisé sur un seul des deux chemins atomiques dans l'interféromètre. Si la lumière est suffisamment loin de résonance, le seul effet sera de déphaser les interférences à cause du déplacement lumineux induit par ce faisceau. Cette expérience semble intéressante car elle peut permettre d'induire un déphasage rapidement modulable ce

³⁴ J. Schmiedmayer et al., Phys. Rev. Lett. 74, 1043 (1995); T. D. Roberts et al. Phys. Rev. Lett. 89, 200406 (2002)

³⁵ C. Champenois et al., J. Phys. II France 7, 523 (1997)

³⁶ M. S. Chapman et al., Phys. Rev. Lett. 75, 3783 (1995), D. A. Kokorowski et al., Phys. Rev. Lett. 86, 2191 (2001)

qui peut être très utile pour d'autres applications. Elle peut permettre aussi de mesurer de manière originale un dipôle de transition atomique.

- la sensibilité d'un interféromètre atomique est suffisante pour détecter les interactions atome-surface, au moins dans les cas favorables. La question la plus délicate est de trouver une configuration expérimentale telle que la moyenne sur la distance atome-surface ne soit pas trop importante. Nous réfléchissons à cette question et nous espérons faire des essais assez rapidement.
- nous avons montré que l'interférométrie atomique peut servir à rechercher si un atome a une charge électrique non nulle et la sensibilité ultime est voisine de 10^{-21} fois la charge électrique de l'électron (soit une charge minimale détectable voisine de 10^{-40} Coulomb !), avec un jet atomique lent. La neutralité électrique du neutron a été mesurée avec une précision comparable, par une expérience qui est également de nature interférométrique. Pour cette expérience, un champ électrique intense appliqué à la fois sur les deux chemins atomiques induit un déphasage du signal d'interférence proportionnel à la charge et ce déphasage change de signe avec le sens du champ électrique.

D'autre part nous comptons optimiser le fonctionnement de notre interféromètre sur divers aspects importants :

- L'utilisation des ordres p de diffraction avec $p > 1$ peut se révéler très intéressante du point de vue pratique puisque l'écart entre faisceaux est proportionnel à p . Cependant, comme dans la seule expérience antérieure à avoir testé cette utilisation, celle de S. A. Lee, nous observons une perte rapide de visibilité quand l'ordre p croît. Plusieurs hypothèses peuvent expliquer cette perte de visibilité et nous souhaitons les tester : décohérence par émission spontanée, déphasages liés au processus de diffraction et présentant une dispersion avec la vitesse ou la trajectoire des atomes, effets des vibrations.
- Nous souhaitons en particulier mesurer précisément les effets des vibrations sur le signal interférométrique, car la sensibilité des interféromètres atomiques aux rotations (effet Sagnac) et aux accélérations est très grande. Le bruit de vibration est donc un paramètre important et nous n'avons pas d'informations précises. Nous avons déjà effectué une modélisation théorique assez complète de la réponse élastique de la barre portant les trois miroirs servant à former les ondes stationnaires laser de l'interféromètre, sous l'influence des forces exercées par ses supports. En fonction des résultats de cette étude, il pourrait être judicieux de concevoir une nouvelle suspension pour l'interféromètre atomique.
- Dans tous les cas, une enceinte à vide mieux adaptée avec un pompage plus propre (probablement en technologie UHV) serait nécessaire pour optimiser les performances de l'interféromètre atomique.
- Nous avons entrepris le développement d'un laser tout solide et puissant émettant à 671 nm. Ce laser utilise le pompage par diode laser à 808 nm de l'ion néodyme dans la matrice YVO_4 ou $GdVO_4$: l'émission est à 1342 nm et par doublage intra-cavité, nous obtiendrons l'émission à 671 nm. Une fois mis au point, ce laser sera plus simple à faire fonctionner et plus stable qu'un laser à colorant. La puissance émise sera aussi plus élevée (nous espérons obtenir de un à quelques Watts monofréquence à 671 nm alors que nous avons au mieux 500 milliwatts actuellement), ce qui nous mènera à une diffraction plus cohérente puisqu'on peut augmenter le désaccord de la fréquence laser par rapport à la résonance atomique. Remarquons que ce laser pourra servir à d'autres équipes travaillant sur le lithium. Enfin, nous pouvons signaler que, dans le cadre de ce développement laser, nous avons entrepris une opération de valorisation, avec

dépôt de brevet sur le développement de nouveaux aimants pour rotateurs de Faraday et diode optique

- Une dernière amélioration de notre interféromètre atomique consistera à remplacer le jet atomique supersonique (lithium ensemencé dans l'argon) par un faisceau atomique effusif ralenti et intensifié par les techniques du refroidissement laser. Ce projet nous permettra d'avoir un faisceau atomique de vitesse beaucoup mieux définie, à quelques m/s près alors que la distribution de vitesse du lithium a une largeur supérieure à 100 m/s, et aussi de gagner sur l'intensité du faisceau atomique. Nous reportons ce développement vers la fin de 2006 pour effectuer les meilleurs choix car le jet atomique actuel a une très grande brillance et nous souhaitons que le développement d'un nouveau jet nous apporte un gain non seulement sur la distribution de vitesse mais aussi sur la brillance.

4.2.3.4. Organisation de congrès

Personnel impliqué : CRo ; CRi ; GT ; JV.

Avec F. Lozes du LAAS, JV a été responsable du comité local d'organisation de 2 colloques couplés : COLOQ8 et HORIZONS DE L'OPTIQUE'03, qui ont eu lieu à Toulouse les 3, 4 et 5 septembre 2003. Nous avons accueilli plus de 300 participants et ces colloques ont été très réussis. Le comité local a impliqué l'activité de nombreux membres du laboratoire.

4.2.4. La mesure de la biréfringence magnétique du vide

La mesure de la **Biréfringence Magnétique du Vide**, autrement dit le projet **BMV**, est une collaboration entre notre laboratoire, le Laboratoire National des Champs Magnétiques Pulsés (LNCMP UMR 5147, Toulouse) et le Laboratoire des Matériaux Avancés (UPS du CNRS 2713, Villeurbanne). Ce projet a démarré en 2000 avec des soutiens financiers du département SPM du CNRS et du Ministère de la Recherche. Carlo Rizzo, qui y consacre 100% de son activité de recherche, est le responsable de cette activité au LCAR et le responsable national du projet. A ce jour, 15 chercheurs et ingénieurs de recherche sont impliqués dans le projet, correspondant à environ 7 chercheurs en équivalent temps plein, plus un certain nombre de personnels techniques dans chaque laboratoire. Le projet n'a pu atteindre sa vitesse de croisière qu'en 2002 lorsque C. Robilliard a rejoint le projet, après son congé de maternité, et elle y consacre aujourd'hui 100% de son activité de recherche. Elle est aussi le responsable adjoint du projet.

Au LCAR, J. Vigué, G. Tréneç, G. Bailly et A. Dupays participent à différents titres au projet. En 2004-2005, nous avons accueilli G. Bialolenker, chercheur du NCRN de Beer Sheva, Israël, qui a passé 9 mois au LCAR en tant que chercheur associé CNRS. Fin 2005, F. Brandi nous rejoindra pour deux ans grâce à une bourse Marie Curie de la CE et, en octobre 2005, B. Pinto da Souza débutera une thèse financée par le ministère.

Au niveau local, le projet a reçu une belle impulsion grâce à l'arrivée au LNCMP en 2004 de R. Battesti, un nouveau Maître de Conférences recruté en section 30, qui consacre 100% de son activité de recherche à notre projet, et de S. Batut, boursier CNRS, qui démarrera en octobre 2005 sa thèse de doctorat. G. Rikken et O. Portugall complètent l'équipe du LNCMP. Au LMA, L. Pinard, P. Ganau et J.M. Mackowski consacrent une fraction de leur activité de recherche à notre projet depuis le démarrage en 2000.

Au cours de ces quatre dernières années, nous avons élargi nos collaborations internes et externes au laboratoire. En particulier, dans le domaine de l'EDQ et des atomes exotiques, un contrat OTAN et un projet de collaboration franco-bulgare, sous la responsabilité de C. Rizzo

et en collaboration avec l'équipe théorique du LCAR, ont été financés. Dans ce cadre, D. Bakalov de l'académie des Sciences bulgare, a effectué plusieurs visites au LCAR dont les détails sont donnés dans le rapport d'activité de l'équipe théorique du LCAR et A. Dupays a soutenu une thèse de doctorat codirigée par C. Rizzo et A. Beswick de l'équipe théorique du LCAR.

Nous avons aussi ouvert une toute nouvelle collaboration avec le CESR de Toulouse, notamment avec G.F. Bignami, dans le domaine astrophysique de la propagation de la lumière autour des étoiles à neutrons magnétisées. Cela nous a conduit à présenter un projet de site toulousain autour de la Matière Noire et l'Énergie du Vide (MaNEV) à l'IN2P3 et à l'ANR. L'IN2P3 a bien reçu notre projet et a donné un premier financement. Nous sommes convoqués fin novembre 2005 au Conseil scientifique de l'IN2P3 pour présenter notre projet. Nous espérons obtenir un soutien ultérieur.

Notre projet est ambitieux et forcément coûteux. Le soutien financier total accordé au projet BMV entre 2002 et 2005 se chiffre autour de 235 000 €. Le soutien de base des trois laboratoires concernés peut être évalué à environ 140 000 € sur les quatre années dont 50 000 € en provenance du LCAR.

4.2.4.1. Objectifs et contexte

Personnel impliqué : CRi ; CRo ; JV ; GT et Collaborations avec LNCMP, LMA
références [6, 14, 26]

La théorie classique de l'électrodynamique, modifiée au début du XX siècle pour prendre en compte les principes quantiques, a fait naître l'électrodynamique quantique (EDQ). Parmi les nouveaux phénomènes prévus par l'EDQ mais jamais observés, on trouve la biréfringence magnétique du vide, autrement dit l'effet Cotton-Mouton du vide. La vitesse de la lumière qui se propage en présence d'un champ magnétique transverse B dépend de sa polarisation. Autrement dit, l'indice de réfraction n_{par} pour la lumière polarisée parallèlement au champ magnétique est différent de l'indice de réfraction n_{perp} pour la lumière polarisée perpendiculairement. La différence Δn entre n_{par} et n_{perp} est proportionnelle à B^2 . Une lumière incidente linéairement polarisée émerge donc de la région de champ magnétique avec une polarisation elliptique.

En s'appuyant sur le modèle de Dirac du vide quantique, Euler et Kochel en 1935, puis Heisenberg et Euler en 1936 ont établi l'expression du lagrangien effectif qui décrit l'interaction entre champs électromagnétiques³⁷. Grâce à leurs travaux on peut calculer pour le vide quantique que $\Delta n / B^2 = 4 \times 10^{-24} \text{ T}^{-2}$. Tel est le défi auquel les expérimentateurs sont confrontés.

L'observation de cet effet constituera la première mise en évidence directe du caractère non linéaire de la propagation de la lumière dans le vide quantique, prévu par l'EDQ. Elle sera évidemment un test supplémentaire de la capacité de cette théorie à reproduire les résultats expérimentaux. En particulier, cela prouvera que l'EDQ prévoit correctement la densité d'énergie du vide, celle-là même qui pourrait être la cause de l'accélération de l'expansion de l'univers.

D'autre part, en 1986 Maiani, Petronzio et Zavattini ont montré que l'existence d'une hypothétique particule pseudoscalaire (ou scalaire), neutre et de spin nul, peut induire une ellipticité sur un faisceau laser linéairement polarisé qui se propage en présence d'un champ magnétique transverse. De même, l'existence de cette particule peut induire une rotation apparente (dichroïsme linéaire) de la polarisation de la lumière³⁸. Cela est dû au fait que le photon, en fonction de sa polarisation, peut se transformer en une de ces particules, soit réelle

³⁷ H.Euler, K.Kochel, Naturwiss. 23 (1935), 246 ; W. Heisenberg, H. Euler, Z. Phys. 38 (1936), 714

³⁸ L. Maiani, R. Petronzio, E. Zavattini, Phys. Lett. 175B (1986) 359.

(dichroïsme), soit virtuelle (ellipticité). C'est le cas en particulier pour l'axion. Cette particule, introduite en 1977 pour résoudre ce qu'on appelle le *strong CP problem* est aujourd'hui considérée comme l'un des constituants les plus crédibles de la matière noire. La mesure conjointe de l'ellipticité et de la rotation apparente de polarisation fixe la valeur de la masse et de la constante de couplage avec les photons de cette particule hypothétique. En pratique, on produit de la matière noire sous champ magnétique et on la détecte par des mesures optiques. Ces effets, dus à une physique non standard, coexistent avec l'effet dû à l'électrodynamique quantique plus classique : notre appareil peut conduire à l'observation de l'un comme de l'autre. Nous pouvons donc étudier la nature de la matière noire avec des mesures optiques sous champ magnétique.

Du fait du très faible couplage avec la matière ordinaire, la matière noire produite par conversion des photons dans le champ magnétique s'échappe de l'appareil tandis que, bien évidemment, on peut arrêter les photons en interposant un écran. Si donc, à la sortie de l'appareil, la matière noire passe à nouveau dans une région de champ magnétique intense, elle peut redevenir photon et on verra de la lumière sortir de l'écran. Ce phénomène est appelé le *shining wall*. Cette conversion en champ magnétique est la base de la recherche des axions émis par le soleil comme par exemple dans l'expérience CAST qui s'effectue au CERN. Ce type d'expérience est aussi à notre portée puisque nous disposons de champs magnétiques très intenses.

Notre projet s'inspire des travaux publiés en 1979 par E. Zavattini et son collaborateur E. Iacopini³⁹ et qui ont donné lieu à des résultats expérimentaux en 1993 grâce à une collaboration avec l'équipe de A. Melissinos de l'Université de Rochester (USA)⁴⁰. Après des tests effectués au CERN, une expérience a été menée aux Brookhaven National Laboratories, NY (USA). Le schéma expérimental proposé en 1979 est une version améliorée de l'appareil utilisé pour les mesures de l'effet Cotton-Mouton dans les gaz. L'ellipticité à mesurer est modulée via le courant d'alimentation de l'aimant qui engendre le champ. Ceci permet d'utiliser une technique de détection en phase. Le chemin optique dans la région soumise au champ magnétique est allongé en utilisant des cavités optiques non-résonnantes multi-passages. La sensibilité de l'appareil a été ainsi améliorée et l'effet Cotton-Mouton du néon et de l'hélium a été mesuré pour la première fois. La valeur de B^2 était voisine de 4 T^2 et le chemin optique valait plus d'un kilomètre ; les résultats concernant le vide sont encore compatibles avec zéro, mais les expérimentateurs sont arrivés à *seulement* cinq ordres de grandeur de l'effet Cotton-Mouton prévu par l'électrodynamique quantique pour un champ de 4 T^2 . La campagne de mesures conduite au BNL a concerné aussi l'ellipticité et le dichroïsme induits par la matière noire, ainsi qu'une expérience de *shining wall*.

A ce jour, l'expérience la plus avancée, encore due à l'équipe de E. Zavattini, est installée aux Laboratori Nazionali INFN de Legnaro en Italie (projet PVLAS, Polarizzazione del Vuoto con LASer)⁴¹. Cette équipe italienne utilise un laser Nd:YAG de $\lambda = 1064 \text{ nm}$, une cavité de finesse 100 000 et un champ continu de 5,5 T sur une longueur de 1 m. Ce champ est produit par une bobine supraconductrice refroidie à l'hélium liquide, développée par le CERN dans les années 80. L'aimant, qui pèse quelques tonnes, est placé sur une table tournante capable de tourner à quelques hertz. Cela permet de moduler l'effet attendu à environ 1 hertz en faisant varier l'angle entre la polarisation de la lumière incidente et le champ magnétique. Des acquisitions de données sont en cours au laboratoire italien depuis trois ans. En 2005, des résultats ont été présentés à l'occasion de congrès et un manuscrit vient

³⁹ I. Iacopini, E. Zavattini, Phys. Lett. 85B (1979) 151

⁴⁰ R. Cameron et al., Phys. Rev. D 47 (1993) 3707

⁴¹ D. Bakalov et al., Quantum Semiclass. Opt. 10 (1998) 239

d'être soumis à la revue *Physical Review Letters*⁴². Ils sont très étonnants : l'équipe a observé un effet de biréfringence qui correspondrait à environ 10 000 fois celui prévu par l'EDQ. Une rotation apparente a aussi été mesurée. Si ces résultats sont confirmés, cela peut être dû à l'existence de matière noire. Ce serait la première observation directe de matière noire dans un laboratoire. Bien évidemment, ces résultats doivent être validés le plus tôt possible par une deuxième expérience complètement indépendante de la première.

Outre le projet BMV, une autre proposition est en cours de développement : le projet Q&A (QED and Axion search), basé à Taiwan et coordonné par W-T Ni. L'expérience consistera en une cavité Fabry-Perot de finesse 100 000 et de longueur 7 m, entourant une région où règne un champ magnétique de 2,5 T. Le champ sera engendré par un ensemble d'aimants permanents de longueur totale 5 m. L'utilisation de ce type d'aimants permet un *duty cycle* proche de 1. Il est aussi prévu de faire tourner les aimants permanents à une fréquence de plusieurs Hertz. Les premiers tests en cours se font avec une cavité de finesse 12 000 et de longueur 3,5 m et un aimant d'environ 1 T sur 0,2 m.

Il apparaîtra clairement dans la suite que le projet BMV est le plus à même de vérifier rapidement les résultats de l'équipe PVLAS et, dans sa version finale, il aura la sensibilité nécessaire pour mesurer la biréfringence induite par un champ magnétique dans le vide, telle qu'elle est prévue par l'EDQ.

4.2.4.2. Description du projet BMV : un test de l'énergie du vide en laboratoire

Personnel impliqué : CRI ; CRo ; JV ; GT et Collaboration avec LNCMP, LMA

Références [6, 14, 26]

L'expérience que nous sommes en train de monter est basée sur une cavité Fabry-Perot de très haute finesse plongée dans un champ magnétique pulsé très intense. Dans ce cadre nous avons proposé d'utiliser un aimant de 25 T sur une longueur de 1,5 m. Pour obtenir un champ aussi élevé, il faut que l'aimant soit pulsé. Avec un tel champ, une finesse entre 5×10^5 et 10^6 et $\lambda = 1064$ nm, l'ellipticité devient de l'ordre de 5×10^{-9} radian, et le temps de mesure de l'ordre de quelques secondes, correspondant à quelques dizaines d'impulsions. En principe, par rapport au projet PVLAS, nous gagnons un facteur supérieur à 10 sur le champ au carré, et un facteur 5 à 10 sur la finesse.

La lumière provenant d'une source laser est polarisée par un prisme polariseur et elle est emmagasinée dans une cavité Fabry-Perot qui entoure la région où le champ magnétique est présent. La lumière sortant de la cavité est analysée par un prisme polariseur. La source de lumière est un laser Nd:YAG ($\lambda = 1064$ nm). En effet, c'est à cette longueur d'onde que les caractéristiques des miroirs réalisables pour la cavité Fabry-Perot sont les meilleures actuellement. Le Laboratoire MA-VIRGO de l'IN2P3 de Lyon, qui est chargé de la réalisation des miroirs pour la cavité Fabry-Perot, a d'ores et déjà fabriqué 4 miroirs de finesse attendue comprise entre 5×10^5 et 10^6 . La technique de détection choisie prévoit que l'effet soit modulé ; cette modulation est obtenue en modulant le champ magnétique. L'aimant pulsé qui a été calculé par le LNCMP donnera une oscillation de B^2 à environ 70 Hz. Par rapport au projet PVLAS, où l'effet est modulé à environ 1 Hz, nous allons réduire tout naturellement le bruit en $1/f$ et approcher le bruit quantique.

⁴² E. Zavattini et al., arXiv :hep-ex/0507107v1 29 July 2005

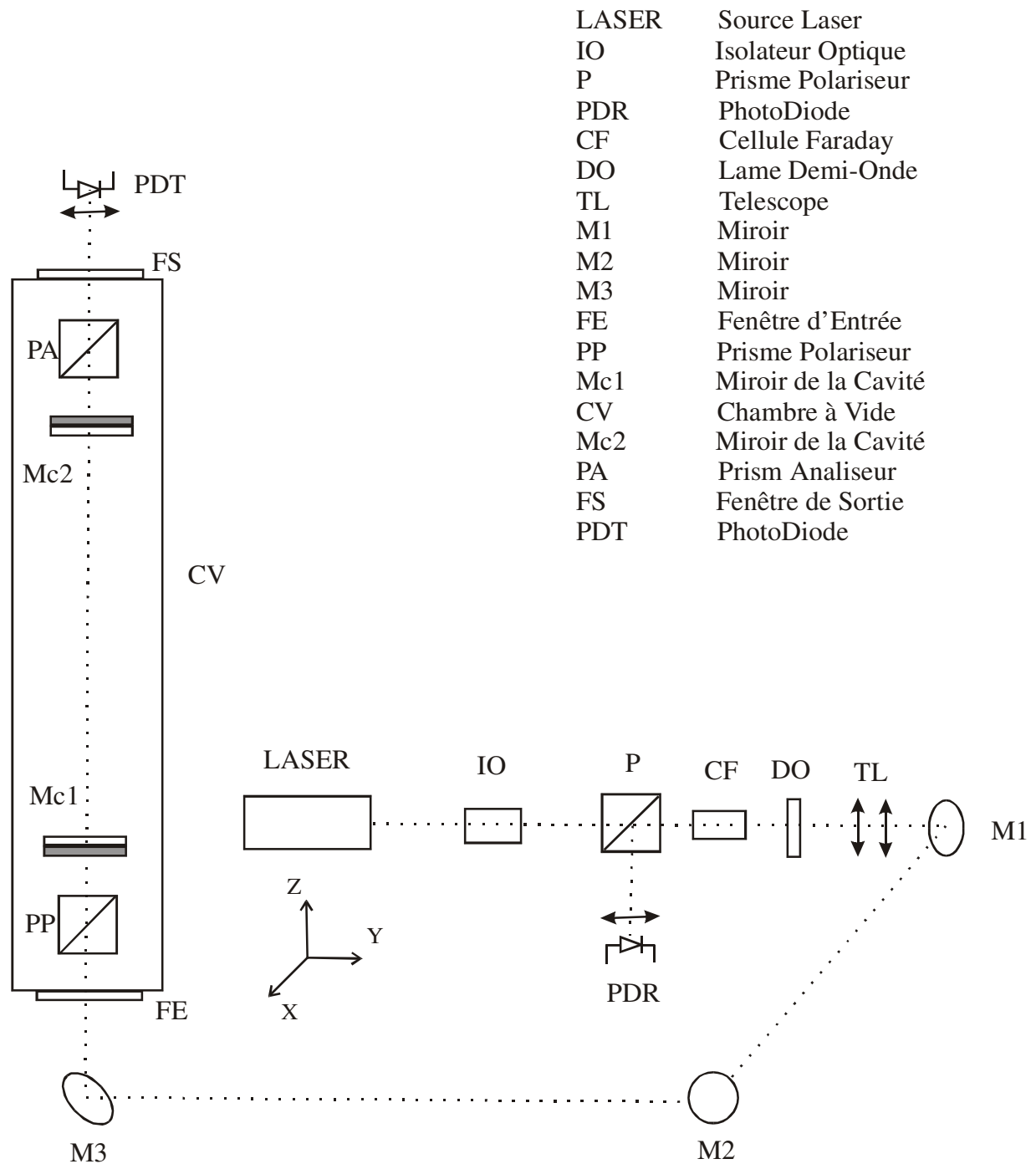


Figure 6 : Schéma du montage optique

4.2.4.3. Développement de la cavité Fabry-Pérot de très grande finesse

La partie optique de l'expérience est développée au LCAR en collaboration avec le LMA de Lyon. Un système de haute précision pour la translation et la rotation sous vide des miroirs de la cavité Fabry-Perot a été conçu et assemblé au LCAR de Toulouse afin d'y mener les tests. La cavité, d'une longueur de 3,6 m, est verticale. Le montage optique est fonctionnel, et le laser est asservi sans difficulté sur la cavité de 3,6 m, avec des miroirs de finesse 3 000. Le LMA de Lyon nous a fourni un jeu de 4 miroirs que nous avons testés. Actuellement, avec ces miroirs nous avons observé des temps de décharge de la cavité d'environ 190 μs (voir figure 7), ce qui correspond à une finesse de 50 000. Les miroirs réalisés par le LMA ont à l'origine une réflectivité correspondant à une finesse 10 fois plus grande.

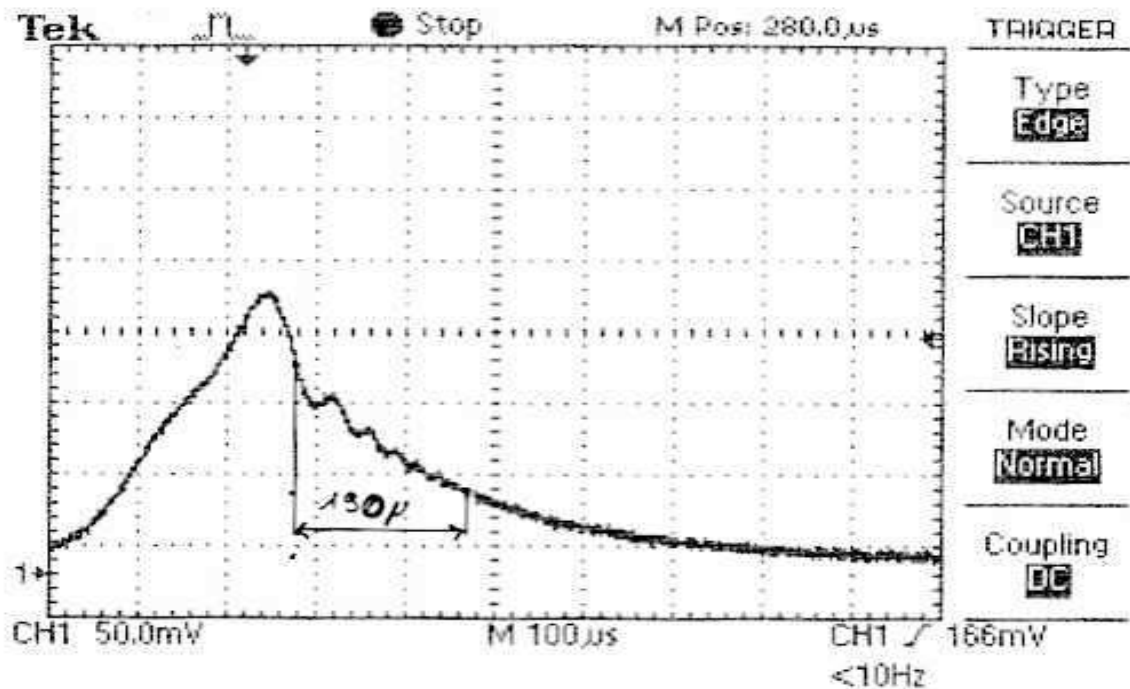


Figure 7 : décharge de la cavité de longueur 3,6 m

Du côté du LMA de l'IN2P3 de Lyon, leur participation au projet ne se limite pas à fournir des miroirs. Cela ne suffirait certainement pas à garantir le succès de notre activité expérimentale. En effet, les performances que nous demandons aux miroirs fabriqués au LMA sont telles qu'une collaboration suivie est nécessaire pour ce qui concerne la manipulation de ces miroirs. Grâce aux bancs de mesure existant au LMA, nous pouvons obtenir des cartes de la surface des miroirs (voir figure 8) avant et après leur utilisation au LCAR et donc tester nos systèmes et nos procédures de manipulation des optiques. Les miroirs sont aussi remis en état au LMA en cas de mauvaise manipulation. Les mesures ainsi effectuées nous ont révélé que nos installations n'étaient pas en mesure de conserver les miroirs dans leur état initial de propreté.

A ce jour, notre souci majeur est donc d'améliorer notre capacité à manipuler de manière adéquate des miroirs qui sont très sensibles aux pollutions.

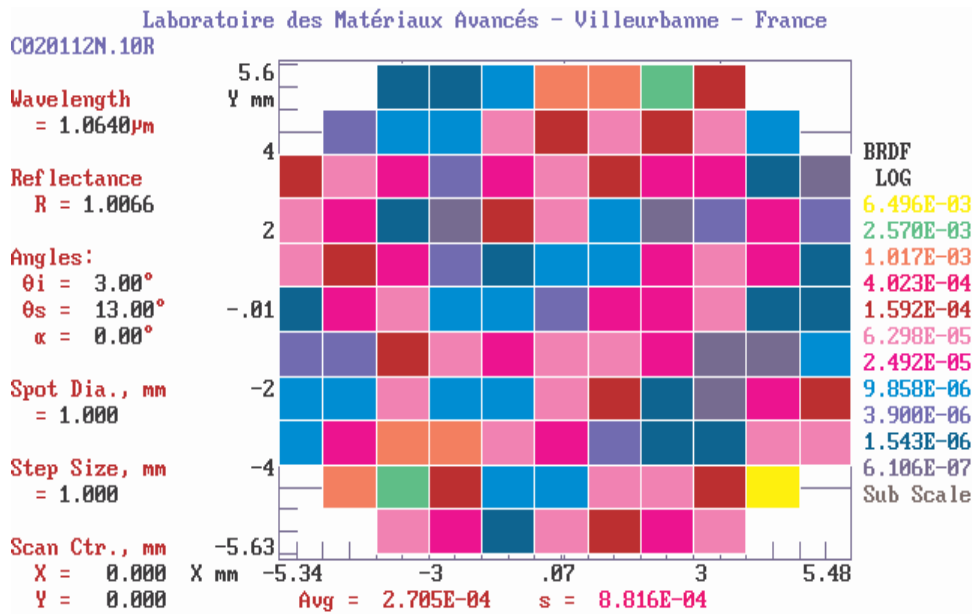


Figure 8 : carte de la surface réfléchissante d'un miroir produit par le LMA

Au LCAR, pour améliorer la finesse de la cavité, plusieurs évolutions essentielles sont en cours :

(i) Grâce au soutien financier du LCAR et d'une action spécifique CNRS en 2004, nous avons revu le système à vide lui-même, que nous avons conçu de manière extrêmement économique au départ, dans le but d'un démarrage rapide de l'expérience. Le nouveau système mis en place permet un pré-pompage propre par une pompe à spirale et une pompe turbo moléculaire, puis un pompage permanent qui n'induit pas de vibrations grâce à une pompe ionique. Par ailleurs, nous avons remplacé les cales piézo-électriques du système d'orientation des miroirs, ainsi que les roulements à billes permettant leur rotation, par des modèles mieux adaptés à l'ultravide.

(ii) Il nous faut également améliorer considérablement la propreté de l'air dans lequel nous manipulons les miroirs avant de les mettre sous vide. Pour cela, la solution la plus efficace et économique se compose d'un ensemble de mini-environnements :

- une hotte à flux laminaire de classe 1 où nous montons les miroirs dans des barillets pour limiter la contamination par les manipulations ultérieures ;
- à chaque extrémité de la cavité, une zone à flux laminaire de classe 10 pour insérer les miroirs dans l'enceinte à vide ;
- devant ces zones, une tente à flux laminaire de classe 100 où se tient le manipulateur équipé de façon adéquate.

Cet équipement a été financé fin 2004-début 2005 par le soutien de base LCAR et par un financement du BQR de l'Université Paul Sabatier. Tout est en place et nous comptons avant la fin de 2005 d'améliorer sensiblement la finesse de notre cavité. L'expérience acquise au LCAR sur la manipulation des miroirs est, bien évidemment, cruciale pour mener à bien l'expérience qui sera installée au LNCMP.

4.2.4.4. Développement et test du système d'asservissement du laser

Personnel impliqué : CRi ; CRo ; JV ; GT ; G. Bailly et l'atelier d'électronique du LCAR ; Rémy Battesti du LNCMP ; collaboration avec LMA ; collaboration avec l'Université de Tel Aviv

En parallèle au développement de la cavité verticale de 3,6 m, nous avons réalisé plusieurs cavités linéaires de finesse entre 10 000 et 50 000 avec des miroirs Newport, que nous avons acheté, et des miroirs fabriqués par la REO de Boulder que des collègues de l'Université de Tel Aviv nous ont donné dans le cadre d'une de nos collaborations internationales. Ces cavités, de longueur 0,6 m, sont d'utilisation plus facile et nous ont permis de tester le système d'asservissement au LCAR. La méthode d'asservissement est celle dite de Pound Drever Hall. La fréquence de notre laser peut être modifiée de façon rapide en agissant sur une cale piezoélectrique qui comprime le cristal laser ou de façon lente en changeant la température du cristal. Nous modulons donc la fréquence du laser par un signal sinusoïdal que nous envoyons sur la cale piezoélectrique par l'entrée de la voie rapide. Cela crée deux bandes latérales en fréquence autour de la fréquence principale. La fréquence de modulation étant plus grande que la largeur de la résonance de la cavité, les bandes latérales sont réfléchies par la cavité sans être déphasées. Une photodiode détecte l'intensité réfléchie qui est due aux bandes latérales et à la lumière à la fréquence principale qui revient déphasée de la cavité. Le signal d'erreur, c'est-à-dire le signal électrique proportionnel à la différence entre la fréquence du laser et la fréquence de résonance de la cavité, est obtenu en comparant la phase des deux composants de l'intensité réfléchie à l'aide d'un mélangeur qui mélange le signal en provenance de la photodiode en réflexion avec le signal sinusoïdal que nous envoyons sur la cale piezoélectrique du cristal laser.

Pour pouvoir asservir le laser sur la résonance de la cavité, il faut que le signal d'erreur soit intégré et amplifié de façon appropriée afin de produire un signal de correction sommé à la modulation que nous envoyons à l'entrée rapide. Pour cela nous avons dessiné et réalisé un circuit d'asservissement avec l'aide de l'atelier d'électronique du LCAR. Nous asservissons donc le laser sur les cavités de 0,6 m assez aisément et nous avons aussi asservi une cavité de 3,6 m de finesse 3 000. Du fait que les miroirs du LMA ont perdu leurs caractéristiques originales le couplage du laser avec la cavité de 3,6 m réalisée avec ces miroirs est si faible que nous n'avons pas assez de signal pour piloter l'asservissement. Ce problème devrait se résoudre tout naturellement dès que nous obtiendrons une meilleure finesse en améliorant la manipulation des miroirs.

A ces jours la stabilité de notre asservissement est évaluée à environ $1 \text{ Hz/Hz}^{1/2}$, ce qui correspond sur une seconde à environ 5 sur 10^{15} par rapport à la fréquence du laser, sur une bande passante de quelque kilohertz. Même si cela nous a permis d'effectuer des mesures physiques en cavité d'un certain intérêt, comme on verra dans le paragraphe suivant, nous devons encore améliorer notre stabilité et notre bande passante pour s'approcher le plus possible du bruit quantique. Cela est une des nos priorités pour mener à bien notre projet. Nous y travaillons déjà.

4.2.4.5. Premiers tests de sensibilité : mesure de l'effet Kerr de l'Oxygène moléculaire

Personnel impliqué : CRi ; CRo ; JV ; GT ; G. Bailly et l'atelier d'électronique du LCAR ; Collaboration avec Rémy Battesti du LNCMP, références [16]

Une fois le laser asservi sur des cavités linéaires, nous avons aussi mis en place l'appareil de mesure complet. Notre but était de réaliser un premier test de sensibilité en biréfringence mais aussi d'effectuer des mesures d'intérêt physique. Nous nous intéressons aux anisotropies de l'indice de réfraction induit par champ électrique (biréfringence Kerr) ou induit par un champ électrique et un champ magnétique croisés (biréfringence magnétoélectrique). L'effet Kerr peut être mesuré soit en cavité linéaire soit en cavité en anneau tandis que les propriétés de symétrie de l'effet magnétoélectrique imposent l'utilisation d'une cavité en anneau. Nous avons donc réalisé une cavité en anneau de finesse environ 6 000 et de *round trip* 2,4 m avec quatre miroirs Newport. La cavité est montée sur un banc qui peut être logé dans une chambre étanche. Sur ce même banc nous avons positionné des électrodes commandées par un amplificateur de puissance donnant des champs électriques oscillants qui atteignent 300 000 V/m. Avec ce dispositif nous avons mesuré l'effet Kerr de l'oxygène moléculaire à $\lambda=1064$ nm. Avec nos paramètres expérimentaux, cet effet correspond à des anisotropies de l'indice de réfraction compris entre 10^{-14} et 10^{-16} (voir figure 9). La sensibilité était de $2 \times 10^{-15} \text{ Hz}^{-1/2}$. La valeur mesurée de $(3,15 \pm 0,85) \times 10^{-25} \text{ m}^2 \cdot \text{V}^{-2} \cdot \text{atm}^{-1}$ est en très bon accord avec la valeur théorique calculé par des méthodes *ab initio*. Nous avons aussi amélioré la précision par rapport aux mesures existantes. Un article vient d'être publié par EPJD.

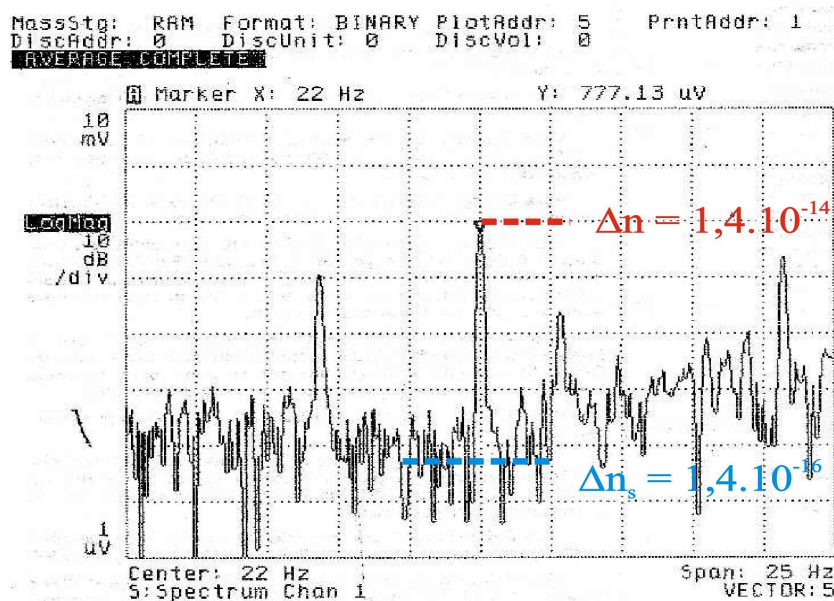


Figure 9 : spectre du signal de la photodiode durant la mesure d'effet Kerr. Le pic à 22 Hz est le signal dû à l'effet Kerr, résultant d'une modulation à 11 Hz du champ électrique. Le fond autour de ce pic correspond à une différence d'indice de réfraction légèrement supérieure à 10^{-16} .

Bien évidemment nous devons améliorer la sensibilité pour pouvoir effectuer des mesures de biréfringence encore plus faibles. Nous avons remarqué que notre bruit s'élève brusquement dès que l'on croise le polariseur de sortie, placé à la sortie de la cavité, avec le polariseur d'entrée. Une des raisons peut être que nos polariseurs ne sont pas de qualité suffisante. Nous comptons les remplacer le plus tôt possible. Les tests vont continuer pour identifier tous les points faibles de notre montage.

4.2.4.6. Résumé des activités au LNCMP

Notre premier objectif est de réaliser un aimant très allongé dans une dimension perpendiculaire au champ magnétique. Cette géométrie est déjà utilisée dans les accélérateurs de particules mais sans être combinée à un générateur pulsé, nécessaire pour produire des champs magnétiques intenses. Le champ souhaité de 25 T impose des contraintes sévères à la structure de l'aimant. En particulier, le renfort de l'aimant, qui doit résister à une pression magnétique de 250 MPa à 25 T (correspondant à 2,5 tonnes/cm²), est à optimiser. Nous avons commencé à faire ce travail d'optimisation à une échelle réduite. La fabrication d'une maquette qui nous permettra d'examiner et de déterminer tous les paramètres de réalisation de l'expérience proposée constitue donc une des premières étapes de ce projet. L'équipe du LNCMP de Toulouse est chargée de la réalisation et du test de la maquette de l'aimant. Des premières bobines ont été fabriquées et testées. La dernière a donné un champ maximal de 13 T sur une longueur de 0,3 m avec un diamètre utile de 20 mm. Un cryostat pour accueillir cette bobine a été dessiné et il sera réalisé d'ici la fin de l'année. Cela nous permettra de pouvoir commencer une campagne de mesures optiques sous champ pulsé. En parallèle, bien sûr, nous continuerons la réalisation de bobines de champ de plus en plus intense, de manière à s'approcher le plus possible des 25 T souhaités.

En parallèle, une salle à empoussièremment contrôlé climatisée vient d'être réalisée, deux bancs de condensateurs sont déjà en place dans deux salles adjacentes et nous travaillons aux installations électriques qui permettront d'alimenter et de commander les bobines. Tout devrait être prêt pour la fin de l'année 2005.

4.2.5. La mesure de la biréfringence magnétique du vide : nos projets pour les prochaines années

4.2.5.1. Planning général du projet

- 2005 : dans un premier temps, nous développons au LNCMP un prototype d'aimant, de taille réduite, permettant de délivrer un champ magnétique pulsé supérieur à 10 T sur environ 30 cm. La dernière bobine testée a permis d'atteindre 13 T, et le cryostat correspondant est en cours de fabrication. Une salle à empoussièremment contrôlé est en train d'être équipée pour accueillir la première expérience.

- 2005 : en parallèle, une cavité de 3,6 m est en fonctionnement au LCAR avec des miroirs de finesse théorique 500 000 réalisés par le LMA. Une expertise de ces miroirs, effectuée au LMA après utilisation, montre qu'ils sont extrêmement pollués. Nous sommes en train d'équiper notre salle expérimentale d'un traitement d'air approprié. A notre connaissance, à partir d'une finesse 200 000, cette cavité aura le facteur de qualité (finesse x longueur) le plus élevé jamais réalisé au monde.

- 2006 : nous déménageons l'expérience montée au LCAR dans la nouvelle salle au LNCMP. Nous complétons ainsi le montage d'une expérience (BMV-Prototype) basée sur un champ supérieur à 10 T sur une longueur d'au moins 0,5 m et sur une cavité de finesse au moins 200 000.

- 2007 : la prise de données suit. Cette expérience permettra déjà de confirmer ou d'infirmer les résultats annoncés par une équipe italienne (PVLAS) qui aurait observé un effet bien plus grand que celui attendu.

- 2008 : nous sommes en mesure de clore cette première phase et d'envisager l'expérience finale (BMV).

Il apparaît évident que notre projet a la capacité de vérifier rapidement les résultats de l'équipe PVLAS (dès 2007 avec BMV-Prototype). Selon le résultat de cette première phase, notre projet évoluera vers sa version finale, de sensibilité optimale (BMV), afin de mesurer pour la première fois la biréfringence magnétique du vide.

4.2.5.2. Autres projets

Personnel impliqué : CRi ; CRo ; JV ; GT ; G. Bailly et l'atelier d'électronique du LCAR ; collaboration avec le LNCMP ; collaboration avec le LMA ; collaboration avec l'Université de Tel Aviv

Nous envisageons aussi une campagne de mesures spécifique à la mise en évidence expérimentale de l'axion, du même type que celle effectuée au BNL autour de l'année 1990 : nous pouvons produire et détecter la matière noire en laboratoire, en mesurant la biréfringence et le dichroïsme induits, mais également en utilisant une paire de bobines dans un montage de type *shining wall*. Dans ce but, nous envisageons de développer des bobines spécialement conçues pour la recherche de la matière noire. On voit en effet dans les équations correspondantes que le carré du champ et la longueur de l'aimant ne jouent pas de la même manière pour l'effet d'EDQ et pour la matière noire, ce qui suggère une optimisation différente des bobines. Cette optimisation dépend de la masse de la particule recherchée et cela dépend des limites astrophysiques sur l'existence de la matière noire.

D'autre part, nous allons continuer au LNCMP nos tests d'asservissement et de sensibilité de l'appareil complet. Dans ce cadre nous comptons continuer aussi nos mesures physiques de faibles biréfringences. En particulier, nous avons dessiné et réalisé un dispositif basé sur des aimants permanents qui donnait un champ magnétique de 0,6 T croisé au champ électrique grâce auquel nous avons pu mesurer au LCAR l'effet Kerr de l'oxygène moléculaire. Notre but est d'observer pour la première fois dans un gaz la biréfringence magnétoélectrique. C'est bien pour cela que nous avons développé la cavité en anneau dont nous avons déjà parlé. Cet effet n'a été observé que dans des liquides⁴³. Nous allons mesurer la biréfringence magnétoélectrique de l'azote moléculaire car pour cette espèce une prévision théorique existe dans la littérature. Notre mesure aura d'autant plus de valeur qu'elle pourra être comparée à une valeur obtenue par un calcul *ab initio*⁴⁴ qui prévoit une valeur $\Delta n = 10^{-17}$ pour nos paramètres expérimentaux.

4.2.6. Nos collaborations internes et externes au laboratoire

Il est évident que notre activité de laboratoire resterait une quête de prouesse technique si elle n'était pas accompagnée par des études complémentaires de nature plus théorique qui situe notre activité dans le domaine plus vaste des interactions fondamentales et qui éclairent l'importance de l'énergie du vide et de la matière noire au niveau astrophysique et cosmologique. Nous collaborons donc constamment avec l'équipe théorique du LCAR et avec des experts reconnus dans le domaine des interactions fondamentales et de l'astrophysique.

Nous gardons aussi des contacts étroits avec des équipes expérimentales qui travaillent dans le domaine des mesures de faibles biréfringences.

⁴³ T. Roth, G.L.J.A. Rikken, PRL, 85 (2000) 4478.

⁴⁴ A. Rizzo et al., J. Chem. Phys., 119 (2003) 11064

4.2.6.1. L'EDQ et les atomes exotiques

Personnel impliqué : CRi ; collaboration avec l'équipe Théorie du LCAR ; D. Bakalov de l'Académie des Sciences de Bulgarie

Références [8, 9, 10, 12, 27]

Depuis longtemps nous collaborons dans ce domaine avec D. Bakalov de Académie des Sciences de Bulgarie. Grâce à un contrat de l'OTAN et à un programme d'échanges soutenu dans le cadre de l'Accord de coopération CNRS/Académie des Sciences de Bulgarie, D. Bakalov a pu passer chaque année une période assez longue au LCAR. Un des fruits de cette collaboration a été le travail de thèse fait par A. Dupays qui a donné lieu à des résultats remarquables.

Notre collaboration a pour objet l'étude des atomes et des molécules exotiques des éléments légers. Par le développement de méthodes théoriques et de techniques expérimentales le projet contribue aux efforts pour obtenir de nouveaux résultats sur la spectroscopie des atomes muoniques de l'hydrogène afin d'en extraire des valeurs de précision améliorée de certaines constantes fondamentales, telles que le rayon électromagnétique et le couplage pseudoscalaire des protons. En particulier, l'analyse du désaccord des valeurs du rayon Zemach du proton, extraites des données sur le décalage hyperfin de l'état fondamental de l'hydrogène par des groupes différents, a montré que l'étude de l'hydrogène muonique serait le seul moyen de résoudre l'apparente contradiction entre leurs résultats.

En 2001, nous avons proposé une nouvelle méthode expérimentale pour la mesure du décalage hyperfin de l'état fondamental de l'atome μ -p, dont l'efficacité dépend d'une manière critique du taux de la réaction de transfert du muon aux noyaux plus lourds. Pendant le travail de thèse de A. Dupays, le calcul du taux de transfert des muons aux noyaux de l'oxygène et du néon, ont été effectués et les résultats reproduisent avec une précision élevée toutes les données expérimentales disponibles, et montrent que ces deux éléments ont les caractéristiques appropriées pour être utilisés dans l'expérience proposée. La recherche des gaz aux caractéristiques optimales a été poursuivie par l'étude théorique de la dépendance de l'énergie de collision du taux de transfert muonique sur le carbone. Les détails de ce travail se trouvent dans le rapport d'activité de l'équipe théorique du LCAR.

Notre méthode expérimentale développée dans le cadre de la mesure de la structure hyperfine de μ -p peut aussi s'appliquer pour mesurer la population, stimulée par un laser accordable, des états ortho dans le cadre d'une possible étude expérimentale de la réaction de capture faible des muons par les protons. Les simulations Monte Carlo de ce processus sont en cours et elles vont certainement montrer qu'il sera possible d'augmenter la sensibilité du taux de capture faible dans l'état ortho d'un ordre de grandeur. Cela permettrait d'extraire les premiers résultats expérimentaux sur le couplage pseudoscalaire des protons : la seule constante des interactions faibles qui n'a jamais été mesurée et dont il n'existe que des estimations théoriques. Nous attendons les premiers résultats de ce travail avant la fin de l'année.

Nous avons demandé le renouvellement du projet de collaboration bilatéral CNRS/Académie des Sciences de Bulgarie et nous avons aussi en cours une demande INTAS avec trois instituts russes et un de Pologne.

4.2.6.2. La physique des astroparticules

Personnel impliqué : CRi ; CRo ; collaboration avec A. Dupays de l'équipe Théorie du LCAR ; G. F. Bignami du CESR ; M. Roncadelli de l'INFN de Pavia

Références [15, 21]

Les champs magnétiques les plus intenses de l'Univers (10^8 - 10^{11} T) sont créés par les étoiles à neutrons. L'environnement proche de ces étoiles effondrées est donc un site privilégié pour l'étude des propriétés magnéto-optiques du vide. En collaboration avec G. Bignami du CESR de Toulouse, nous avons mis en évidence que les photons émis dans notre direction par le compagnon d'un pulsar binaire peuvent être déviés, du fait de la non-linéarité du vide quantique, pour produire un effet similaire à celui des lentilles gravitationnelles. L'observation de cet effet serait une confirmation des prévisions de l'électrodynamique quantique et pourrait, en retour, permettre de contraindre la géométrie et la distribution du champ magnétique de l'étoile compacte. Nous avons prédit en particulier que le système binaire d'étoiles à neutrons J0737-3039, tout récemment découvert, semble être un candidat idéal pour observer la biréfringence magnétique à l'échelle cosmologique. Nos résultats, publiés dans *Physical Review Letters*, ont attiré l'attention de la communauté scientifique internationale et nous avons été l'objet d'un article dans *Science Magazine* du 20 mai 2005 et dans *Physics World* de juin 2005. En collaboration aussi avec M. Roncadelli de l'INFN de Pavia, Italie, nous nous intéressons maintenant à la production de matière noire axionique autour des étoiles à neutrons, et en particulier encore dans le système binaire d'étoiles à neutrons J0737-3039, un manuscrit vient d'être accepté à *Physical Review Letters*.

Suite à ces collaborations, nous sommes en train de préparer une demande de Programme PluriFormations (PPF) « Astrophysique et particules », regroupant le laboratoire d'astrophysique de l'OMP, le CESR, l'IRSAMC, le LNCMP et le laboratoire d'Astroparticules de Montpellier.

4.2.6.3. L'optique

Personnel impliqué : CRi ; CRo ; JV ; GT ; G. Bailly et l'atelier d'électronique du LCAR ; collaboration avec R. Battesti du LNCMP ; collaboration avec le LMA ; collaboration avec l'Université de Tel Aviv

Référence [16]

Nous gardons des contacts très étroits, bien qu'informels, avec le projet PVLAS et en particulier avec E. Zavattini et G. Cantatore, le coordinateur de ce projet, qui est venu plusieurs fois à Toulouse. Cela nous permet d'échanger des informations sur les solutions expérimentales adoptées par l'un ou l'autre projet et d'échanger des informations sur nos résultats respectifs et perspectives futures. En effet, nos deux expériences ne sont pas en concurrence. Nos résultats sont attendus. On peut facilement imaginer avec quel intérêt la nouvelle d'une hypothétique confirmation à Toulouse des résultats de PVLAS serait reçue en Italie.

Bien que l'accord de collaboration avec l'Université de Tel Aviv et le NRCN de Beer Sheva dans le cadre du PAI arc-en-ciel se soit terminé en 2002, nous avons gardé les contacts. Nous avons échangé du matériel (prototype du circuit d'asservissements, miroirs, chambre à vide ...) et des informations en particulier dans le domaine de l'effet Kerr de l'oxygène que le groupe de A. Arie de Tel Aviv avait mesuré avant nous avec une précision bien inférieure. Finalement, nous avons demandé et obtenu un poste de chercheur associé pour G. Bialolenker du NRCN de Beer Sheva. En particulier, l'aide de nos collègues israéliens a été très

importante dans le cadre de nos mesures d'effet Kerr en termes de matériel et en terme de moyens humains.

4.2.6.4. Organisation de congrès

A. Lambrecht du LKB de Paris, D.Bakalov et C.Rizzo ont organisé un colloque international à l'Ecole des Houches qui a eu lieu du 5 au 9 juin 2005 : QED 2005, Quantum Vacuum and the search for New Forces.

4.3. Les collaborations nationales et internationales

Interférométrie atomique

Dates	Programme/ financement	Correspondant	Université/ Institut –ville	Pays	Thème	Publications
2002- 2004	PAI PROCOPE	J. P. Toennies	MPI für Stromungsforschung	Allemagne	Test de la neutralité électrique de l'hélium	
2003- 2005		O. Cugat	Laboratoire d'Electrotechnique, INPG/UJF	Grenoble	Développement d'aimants permanents	demande de brevet
2003- 2005		P. Juncar F. Balembois	INM CNAM IOTA	Paris Orsay	Développement d'un laser à 671 nm	
2004- 2005		A. Brillet	Virgo et Obs. de Nice	Nice	Aimants pour rotateurs de Faraday	
2003- ..		M. Leduc	LKB ENS Paris	Paris	Collisions d'atomes froids	[28]

Projet BMV

Dates	Programme/ financement	Correspondant	Université/ Institut –ville	Pays	Thème	Publications
2001- 2002	PAI arc-en ciel CNRS	A. Arie G. Bialolenker	Tel Aviv Beer Sheva	Israël	Mesure de faibles birefringences	[16]
2002- 2003	Linkage Grant OTAN	D. Bakalov	Sofia	Bulgaria	Atomes Exotiques Interaction Fondamentales	[8 , 9, 10]
2004- 2005	Coopération CNRS/BAS	D. Bakalov	Sofia	Bulgaria	Atomes Exotiques Interaction Fondamentales	[8 , 9, 10]
2007- 2010	MENRT sous réserve de sélection	voir § 2.6.2	PPF Astro- physique et particules	France	Astroparticules	

4.4. Les soutiens financiers obtenus au cours des 4 années

Interférométrie atomique

Dates	Programme	Titre du projet	Montant
2002	Région Midi-Pyrénées	Développements en interférométrie atomique	23 245 € TTC
2003	Région Midi-Pyrénées	Développements en interférométrie atomique	33 287 € TTC
2004	BQR UPS et soutien IRSAMC	Développement laser à 671 nm	12 000 € TTC 2 000 € TTC
2004-2005	Contrat BNM/LNE	Développement laser à 671 nm	16 740 € TTC
2004	Action Spécifique CNRS	Développements d'aimants	10 500 € TTC
2005	Action Spécifique CNRS	Interférométrie atomique	29 900 € TTC

Projet BMV

Dates	Programme	Titre du projet	Montant
2002	ATIP Jeunes chercheurs CNRS	Projet BMV	59 800 € TTC
2003	BQR UPS et soutien IRSAMC	Projet BMV	8 000 € TTC
2004	Action Spécifique CNRS	Projet BMV	17 940 € TTC
2005	BQR UPS et soutien IRSAMC	Projet BMV	16 000 € TTC
2005	Action Spécifique IN2P3	Matière Noire Energie du Vide	8 372 € TTC

4.5. Les publications

4.5.1. Articles dans des revues avec comité de lecture

- [1] A. Bastida, J. Zuniga, A. Requena, B. Miguel, J. A. Beswick, J. Vigué and N. Halberstadt, « Molecular dynamics simulation of the I2(X)...Ar isomers population in a free jet expansion : thermodynamics versus kinetic control », *J. Chem. Phys.* **116**, 1944-53 (2002)
- [2] A. Miffre, R. Delhuille, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo and J. Vigué, « The three-grating Mach-Zehnder optical interferometer : a tutorial approach using particle optics », *European Journal of Physics D*, **23**, 623-635 (2002)
- [3] R. Delhuille, A. Miffre, E. Lavallette, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué, H. J. Loesch and J. P. Gauyacq, « Optimization of a Langmuir-Taylor detector for lithium », *Rev. Scient. Instrum.* **73**, 2249-58 (2002)
- [4] R. Delhuille, C. Champenois, M. Büchner, L. Jozefowski, C. Rizzo, G. Tréneç and J. Vigué, « High contrast Mach-Zehnder lithium atom interferometer in the Bragg regime », *Appl. Phys. B*. **74**, 489-493 (2002)
- [5] R. Mathevet, R. Delhuille, C. Rizzo, « Computation of the phase induced by non-Newtonian gravitational potentials in atom interferometry », *Class. Quantum Grav.* **19** (2002) L37-L44.
- [6] G.L.J.A. Rikken, C. Rizzo, « Magnetolectric anisotropy of the quantum vacuum », *Phys. Rev. A* **67** (2003), 015801-1-2.

- [7] C. Cappelli, A. Rizzo, B. Mennucci, J. Tomasi, R. Cammi, G.L.J.A. Rikken, R. Mathevet, C. Rizzo, « The Cotton-Mouton effect of furan and its homologues in the gas phase, for pure liquids and in solution », *J. Chem. Phys.* **118**, 10712-10724 (2003)
- [8] A. Dupays, B. Lepetit, J. A. Beswick, C. Rizzo, D. Bakalov, « Calculation of muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen », *Phys. Rev. A* **67**, 062505-1-6 (2003)
- [9] A. Dupays, B. Lepetit, J. A. Beswick, C. Rizzo, D. Bakalov, « Proton Zemach radius from measurements of the hyperfine splitting of hydrogen and muonic hydrogen », *Phys. Rev. A* **68**, 052503-1-5 (2003)
- [10] A. Dupays, B. Lepetit, J. A. Beswick, C. Rizzo, D. Bakalov, « Hyperspherical elliptic coordinate treatment of muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen », *Phys. Rev. A* **68**, 062506-1-5 (2003)
- [11] M. Büchner, R. Delhuille, A. Miffre, C. Robilliard, J. vigué and C. Champenois, « Diffraction phases in atom interferometers », *Phys. Rev. A*, **68**, 013607 (2003) preprint <http://hal.ccsd.cnrs.fr/ccsd-00000078>
- [12] A. Dupays, B. Lepetit, J.A. Beswick, C. Rizzo, D. Bakalov, « Nonzero total-angular-momentum three-body dynamics using hyperspherical elliptic coordinates: Application to muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen and neon », *Phys. Rev. A* **69**, 062501-1-8 (2004)
- [13] A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç and J. Vigué, « Anomalous cooling of the parallel velocity in seeded beams », *Phys. Rev. A* **70**, 030701(R) (2004), preprint <http://hal.ccsd.cnrs.fr/ccsd-00001006>
- [14] C. Rizzo, G.L.J.A. Rikken, « Magneto-Electro-Optical Properties of the Quantum Vacuum and Lorentz Invariance », *Physica Scripta* **71**, C5-8 (2005),
- [15] A. Dupays, C. Robilliard, C. Rizzo, G.F. Bignami, « Observing Quantum Vacuum Lensing in a Neutron Star Binary System », *Phys. Rev. Lett.* **94**, 161101 (2005)
- [16] F. Bielsa, R. Battesti, C. Robilliard, G. Bialolenker, G. Bailly, G. Tréneç, A. Rizzo, C. Rizzo, « Kerr effect of molecular oxygen at $\lambda = 1064$ nm : experiment and theory », *Eur. Phys. J. D* (2005) DOI : 10.1140/epjd/e2005-00243-1.
- [17] A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç and J. Vigué, « Parallel temperatures in supersonic beams: Ultracooling of light atoms seeded in a heavier carrier gas », *J. Chem. Phys.* **122**, 094308 (2005), preprint <http://hal.ccsd.cnrs.fr/ccsd-00002148>.
- [18] A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç and J. Vigué, « Lithium atom interferometer using laser diffraction: description and experiments », *Eur. Phys. J. D* **33**, 99-112 (2005); preprint <http://hal.ccsd.cnrs.fr/ccsd-00003124>
- [19] A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç and J. Vigué, « Measurement of the electric polarizability of lithium by atom interferometry », soumis à *Phys. Rev. Lett.*, preprint sur <https://hal.ccsd.cnrs.fr/ccsd-00005359>

[20] A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç and J. Vigué, « Atom interferometry measurement of the electric polarizability of lithium », accepté à Eur. Phys. J. D., preprint sur <https://hal.ccsd.cnrs.fr/ccsd-00007737>.

[21] A. Dupays, C. Rizzo, M. Roncadelli, G. F. Bignami, « Looking for Light Pseudoscalar Bosons in Gamma-Rays from Binary Pulsars », accepté à Phys. Rev. Lett.

4.5.2. Congrès avec acte

[23] R. Delhuille, A. Miffre, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo G. Tréneç and J. Vigué, « Fringe contrast in Mach-Zehnder atom interferometers », Acta Physica Polonica B **33**, 2157-71 (2002)

[24] M. Büchner, R. Delhuille, A. Miffre, C. Robilliard, J. Vigué and C. Champenois, « Diffraction phases in atom interferometry », J. Phys. IV **119**, 139-140 (2004) (COLOQ8 Proceedings)

[25] A. Miffre, M. Jacquy, R. Delhuille, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç and J. Vigué, « An atom interferometer using thermal lithium atoms », J. Phys. IV **119**, 233-234 (2004) (Actes de COLOQ8, Toulouse, France Sept. 2003)

[26] C. Rizzo, C. Robilliard, G. Tréneç, « La biréfringence magnétique du vide : théorie et expérience », J. Phys. IV France **119**, 97-103 (2003). (Actes de COLOQ8, Toulouse, France, Sept. 2003)

[27] D. Bakalov, A. Beswick, A. Dupays, C. Rizzo, « La biréfringence magnétique du vide : théorie et expérience », Canadian Journal of Physics **83**, 351-356 (2005). (Acte de HYDROGEN3, Rio de Janeiro, Bresil)

[28] M. Leduc and J. Vigué, « Interplay between theoretical quantum chemistry and cold atom experiments », Accepté pour publication dans Theoretica Chimica Acta, (Numéro spécial en l'honneur de J. P. Malrieu)

4.5.3. Conférences invitées

R. Delhuille, A. Miffre, L. Jozefowski, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç and J. Vigué, « First experiments with a Mach-Zehnder atom interferometer », Colloque PAAT 2002, Cracovie (31/05-2/06/2002)

R. Delhuille, A. Miffre, L. Jozefowski, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç and J. Vigué, « Interférométrie atomique avec l'atome de lithium », Colloque PAMO 2002, Bourges (1- 4 /07/ 2002)

A. Miffre, R. Delhuille, M. Büchner, C. Robilliard, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué, « Atom interferometry on a thermal lithium beam », Symposium "Cold atoms and quantum information" Collège de France, 7 février 2003, (2003).

A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç and J. Vigué, « Atom interferometry », ECAMP/PAMO, Rennes Juillet 2004

A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç and J. Vigué, « Interférences atomiques de contraste élevé avec le lithium aux énergies thermiques », Journées du GREX 2004, Nice (27-29 Octobre 2004)

C. Rizzo, « La biréfringence magnétique du vide : théorie et expérience », COLOQ8, Toulouse, Septembre 2004.

C. Robilliard, « The BMV project: status of the experiment », QED2005, Les Houches, France.

C. Rizzo, « Probing Dark Matter and vacuum Energy by light Propagation in a Magnetic Field », Astroparticle Meeting : dark energies, Dark matters, IHP, Paris, 28-29 Avril 2005.

A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç and J. Vigué « Interférométrie atomique avec le lithium aux énergies thermiques », Congrès Général de la Société Française de Physique et de Belgian Physical Society, Lille 29 Août-2 Septembre 2005

A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç and J. Vigué, « Interférométrie atomique avec le lithium », COLOQ9, Dijon 7-9 Septembre 2005.

4.5.4. Articles de vulgarisation,

J. Vigué, « La lumière dévie bien les électrons » (Article sur l'Observation récente de l'effet KAPITZA-DIRAC avec les électrons, *La Recherche*, **349**, 18-19 (janvier 2002)

R. Delhuille, A. Miffre, L. Jozefowski, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç et J. Vigué, « Interférométrie atomique avec le lithium », *Bulletin de la Société Française de Physique*, **135**, 14-16 (2002)

R. Delhuille, A. Miffre, L. Jozefowski, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Robilliard, C. Rizzo, G. Tréneç and J. Vigué, « Atom Interferometry », *Europhysics News*, **34/4**, 129-131 (2003)

4.5.5. Posters et communications orales

- 7th Workshop on Atym Optics and Interferometry, Lunteren (The Netherlands) September 28-October 2, 2002

Interferometry with thermal lithium atoms ; R. Delhuille, A. Miffre, M. Büchner, B. Viaris de Lesegno, C. Rizzo, G. Tréneç and J. Vigué

- HYPER SYMPOSIUM I, Paris 4-6 Novembre 2002

Interferometry with thermal lithium atoms ; R. Delhuille, A. Miffre, M. Büchner, B. Viaris de Lesegno, C. Rizzo, G. Tréneç and J. Vigué

- COLOQ8, Toulouse 3-5 septembre 2003

Interférométrie atomique avec le lithium ; A. Miffre, M. Jacquy, R. Delhuille, M. Büchner, G. Tréneç et J. Vigué

Le rôle des phases de diffraction dans l'interférométrie atomique ; M. Büchner, R. Delhuille, A. Miffre, C. Robilliard, C. Champenois et J. Vigué

- FRISNO 7, Centre de Physique des Houches, 16-21 Février 2003

Very high finesse cavities for magneto-electro optics of dilute matter; A. Arie, G. Bialolenker, O. Portugall, G.L.J.A. Rikken, C. Rizzo, C. Robilliard, G. Tréneç, J. Vigué

- 8th ECAMP Rennes 6–10 Juillet 2004

Fringe Contrast in Mach-Zehnder atom interferometers ; A. Miffre, M. Jacquey, R. Delhuile, M. Büchner, G. Tréneç and J. Vigué

Anomalous Cooling of the parallel velocity in seeded beams ; A. Miffre, M. Jacquey, R. Delhuile, M. Büchner, G. Tréneç and J. Vigué

- Quantum Atom Optics, Centre de Physique des Houches, 14-18 Février 2005

Interferometry with thermal lithium atoms ; A. Miffre, M. Jacquey, M. Büchner, G. Tréneç and J. Vigué

- ESA-ONERA Workshop Quantum Mechanics for Space, Paris 30 Mars-1er Avril 2005

Atom interferometry with thermal lithium (comm. orale) ; M. Büchner, A. Miffre, M. Jacquey and J. Vigué.

5. Manipulation d'atomes par champs proches issus de nanostructures

5.1. Composition de l'équipe

Responsable :

John Weiner

Permanents :

John Weiner (Professeur)

Renaud Mathevet (Maître de Conférence)

ATER, post-docs :

<i>Prénom</i>	<i>Nom</i>	<i>Financement</i>	<i>Arrivée</i>	<i>Départ</i>
Bruno	Viaris de Lesegno	Nanocold	09/2002	08/2004
Colm	O'Dwyer	FASTNet	09/2003	11/2004
Andréa	Balocchi	FASTNet	03/2004	02/2005
Gaëtan	Lévêque	Ministère	09/2003	08/2003

Doctorants :

<i>Prénom</i>	<i>Nom</i>	<i>Financement</i>	<i>Arrivée</i>	<i>Départ</i>
Gaëtan	Lévêque	AMN	09/2000	08/2003
Guillaume	Gay	MEN	09/2002	
Olivier	Alloschery	AMN	09/2003	

Visiteurs :

<i>Prénom</i>	<i>Nom</i>	<i>Université</i>	<i>Financement</i>	<i>Arrivée</i>	<i>Départ</i>
Carsten	Henkel	Potsdam	MEN	03/2003	04/2004

Stagiaires :

<i>Prénom</i>	<i>Nom</i>	<i>Financement</i>	<i>Arrivée</i>	<i>Départ</i>
Sorin	Balmus	FASTNet	10/2003	03/2004
Sorin	Balmus	FASTNet	05/2004	07/2004

5.2. Compte-rendu de l'activité scientifique « à 4 ans » 2002-2005

Le thème principal de notre équipe est la manipulation d'atomes froids par des forces lumineuses issues de réseaux d'objets micro- ou nano-structurés. Pendant la période de ce rapport nous avons concentré nos efforts sur deux sous-thèmes, (1) des études du dépôt d'atomes sur des monocouches autoassemblées (SAMs) avec le but de développer un « stylo atomique » et (2) le développement de nanostructures qui modulent les propriétés de la lumière telles que sa distribution spatiale, polarisation, et gradient du champ. Ces structures seront utilisées ultérieurement pour le guidage d'atomes et leur positionnement de précision sur des surfaces. Les citations réfèrent à la liste de publications.

5.2.1. Stylo atomique (Atom Pencil)

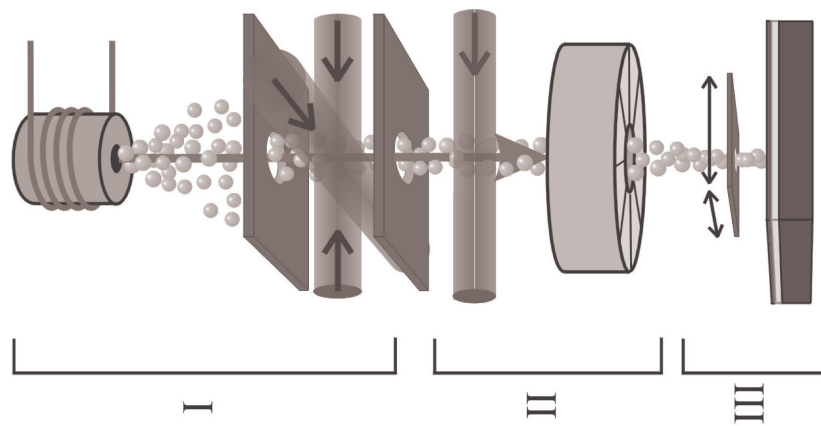


Figure 1 : Diagramme de l'appareil « stylo atomique ». *Zone I* comprend le four de Cs et la collimation par mélasse optique transverse. *Zone II* comprend la polarisation du spin d'atomes de Cs et la focalisation magnétique. *Zone III* montre le masque et la surface (SAM) du dépôt.

L'idée de base est de faire passer un jet d'atomes de césium (Cs) à travers un masque matériel dans lequel est percé un réseau de trous à l'échelle nanométrique. Ce masque est juxtaposé au-dessus d'un substrat couvert d'une monocouche de SAM. Les atomes qui passent le masque interagissent chimiquement avec le SAM (un alkanthiol) et créent un réseau de trous gravés dans le SAM. Le substrat est translaté dans le plan x-y par un actuateur qui permet « l'écriture » de formes arbitraires. Cette gravure est ensuite imagée par un microscope de force atomique (AFM). La Figure 1 est un diagramme de l'appareil. La zone I contient la source atomique (un four de Cs) et la collimation du faisceau par refroidissement optique des composantes de vitesses transverses. Dans la zone II est prévue une polarisation du spin d'atomes de Cs suivie par une focalisation quadrupole magnétique. A ce jour cette zone n'est pas encore mise en place. Elle constitue une étape principale de l'amélioration de la vitesse d'écriture que nous entamerons cette année. La zone III indique le masque matériel à travers duquel le faisceau de Cs passe avant de percuter la surface de dépôt. Jusqu'à présent nous avons utilisé des surfaces SAMs mais les surfaces semi-conducteurs ont été prévues depuis le début de ce projet. Nous avons commencé par des SAMs parce que la technologie de leur imagerie est mieux maîtrisée.

5.2.1.1. Etudes de SAMs

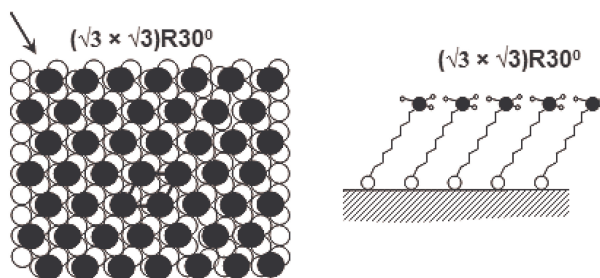


Figure 2 : Diagramme montrant comment les molécules de SAM adhèrent à la façade d'or {111}. Les alkanthiols sont de longues chaînes d'hydrocarbures CH_2 terminées par un groupe SH à un bout et un groupe CH_3 à l'autre. Le groupe SH s'attache à l'or.

Il a fallu commencer ce projet par une investigation de la surface « d'écriture ». Un schéma de l'adhésion des molécules SAM sur l'or est indiqué en Figure 2. Si l'adhésion du SAM n'est pas uniforme les figures atomiques ne sont pas reproductibles. Nous avons trouvé que la meilleure qualité de SAM résulte d'une meilleure qualité de couche d'or, et en particulier que le dépôt d'or par « sputtering » produit de grains d'or plus grands et plus uniformes en façade cristalline que le dépôt par évaporation. Une investigation très détaillée a été menée et publiée [9]. Cette partie du projet était réalisée avec un post-doc FASTNet (EU-RTN), Colm O'Dwyer, qui nous a appris des techniques d'imagerie et d'analyse de surfaces. Sa contribution était indispensable, surtout pour un groupe avec des compétences en physique atomique et optique.

5.2.1.2. Etudes de bouchage

Après le « papier » il a fallu s'occuper du « stylo ». En collaboration avec le groupe de E. Osterschulze à Kaiserslautern, et dans le cadre d'un consortium EU-IST « NanoCold », nous avons étudié l'utilisation de réseaux de nanostructures fabriqués en oxyde de silicium avec une technique de « gravure sèche par plasma ». Un exemple de ces structures est montré en Figure 3. Le passage d'un flux de Cs à travers la pointe gravée dans le silicium produit un dépôt très localisé. En effet la taille du dépôt est limitée par le diamètre du trou dans la pointe (de l'ordre de 200 nm), la proximité de la pointe à la surface de SAM (une dizaine de microns) et la divergence résiduelle du faisceau de Cs (quelques dixièmes de radians). Cependant nous avons trouvé un effet de « bouchage » après 30 minutes de dépôt, ce qui est montré en Figure 4. Après une étude détaillée du mécanisme de ce bouchage nous avons conclu qu'il n'est pas dû à un collage intrinsèque des atomes de Cs sur la structure, mais par la rétrodiffusion du flux de Cs de la surface du SAM vers la pointe. Nous avons décrit ces effets dans [11].

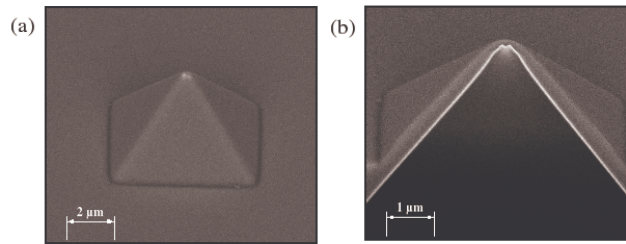


Figure 3 : Image d'un microscope électronique de balayage (SEM) de nanostructures utilisées pour la « pointe » du stylo atomique. La pyramide est gravée dans une galette de silicium et le trou dans la pointe est percé par un procédé de « gravure sèche par plasma ».

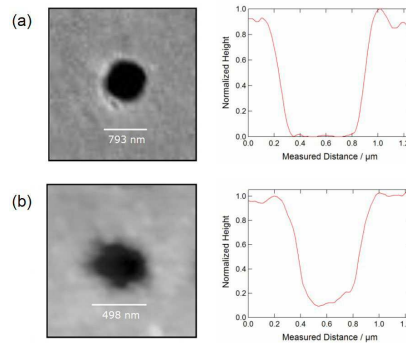


Figure 4 : Images AFM des trous gravés en SAM. Image (a) après 15 minutes de dépôt et image (b) après 30 minutes de dépôt, montrant la dégradation du gradient des flancs l'irrégularité de diamètre.

5.2.1.3. Réseaux de masques et de figures gravées

La Figure 5 montre une image AFM du réseau de trous gravé dans un SAM. Le diamètre des trous est moins que 300 nm, et ils sont séparés par 25 μm. Les conditions d'optimisation de résolution et de l'efficacité d'écriture ont été publiées en [11] et [12]. La prochaine étape sera de translater le « papier » en dessous de ce réseau de « stylos » afin d'écrire des formes arbitraires en parallèle.

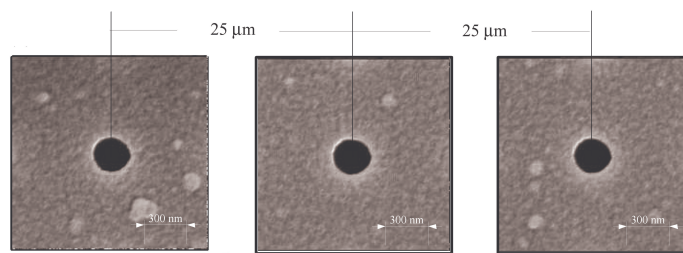


Figure 5 : Image AFM de l'écriture d'un réseau de trous gravé sur un substrat SAM. La prochaine étape d'amélioration sera de réduire le diamètre en dessous de 50 nm et augmenter la densité des structures. Le stylo atomique a été réalisé en collaboration avec les groupes de E. Osterschulze à Kaiserlautern, D. Meschede à Bonn et E. Arimondo à Pise et dans le cadre du projet NanoCold de l'Union Européenne.

5.2.2. Champs optiques issus de nanostructures

Dans le rapport à mi-parcours 2002-2003 nous avons décrit nos études de l'application d'anneaux microniques couplés pour le développement de pièges optiques profonds pour les atomes froids. Nous avons continué nos études de champs proches taillés par des nanostructures diélectriques afin de trouver des cas où le gradient de l'intensité optique peut être augmenté au-dessus du gradient « naturel » d'une onde stationnaire. Ces études constituent la thèse de Gaëtan Lévêque et sont issues de notre investigation de la diffraction atomique par potentiels optiques périodiques et sublongueur d'onde [1], [3], [5], [7] (cf. Rapport d'Activité 1998-2001, page 51). En même temps nous avons commencé à regarder d'autres structures et en particulier les possibilités de couches métalliques très minces nanostructurées par FIB (focused ion beam). On s'est mis en collaboration avec le groupe de Thomas Ebbesen à l'institut d'ISIS de l'Université Pasteur à Strasbourg. Un de nos collaborateurs de ce groupe, Henri Lezec, nous a fabriqué des fentes sublongueur d'onde flanquées par une série de sillons symétriquement placée de chaque côté de la fente. La Figure 7 montre un exemple d'une telle structure. Une mesure directe de la distribution du champ n'est pas très facile : on a recours soit à calculs numériques soit aux techniques de la microscopie optique champs-proches. Ces dernières sont dotées d'une résolution sublongueur d'onde mais elles ne sont pas bien adaptées à la mesure du champ sur une plage d'une dizaine de microns. Nous avons conçu l'idée d'utiliser la fluorescence atomique pour cartographier les champs optiques à relativement grande échelle. Si l'on fait très attention de maintenir l'excitation atomique dans le régime linéaire, on peut montrer que l'intensité de fluorescence est directement proportionnelle à l'intensité du champ issu de la nanostructure. L'appareil utilisé est une adaptation de notre jet atomique de Cs et est montré en Figure 6.

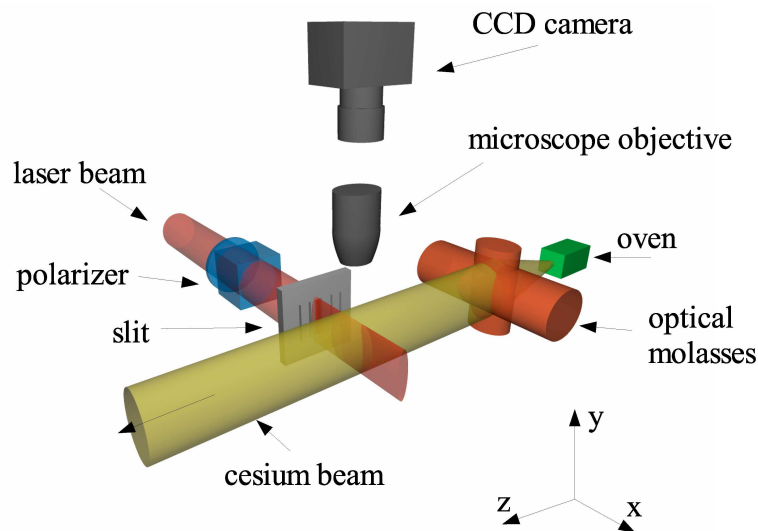


Figure 6 : Diagramme de l'appareil utilisé pour la cartographie de champs optiques issus de nanostructures. Le faisceau de Cs est pareil à la Figure 1. Une source laser, accordée sur la raie de résonance de Cs, illumine la structure par derrière. La distribution de l'intensité de fluorescence est enregistrée par un objectif de microscope et une caméra CCD.

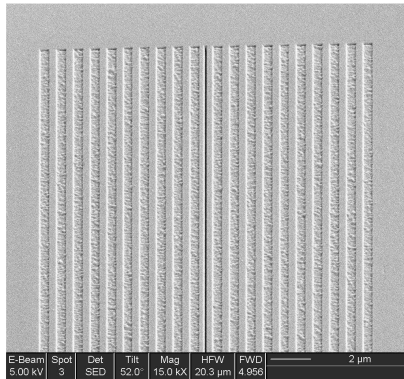


Figure 7 Image SEM d'une structure d'une fente sublongueur d'onde flanquée par une série de sillons. L'effet des sillons est de collimater la distribution de lumière issue de la structure lorsqu'elle est illuminée par derrière.

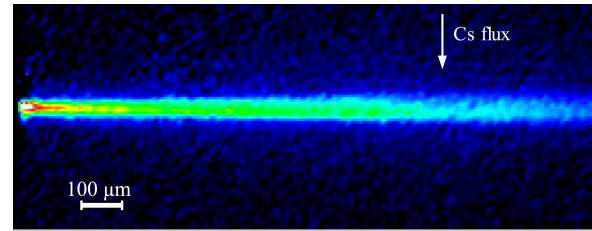


Figure 8 Image d'une caméra CCD de la fluorescence atomique issue d'un flux d'atomes de Cs traversant le champ optique issu de nanostructure montrée en Figure 7.

Avec ce dispositif nous avons caractérisé la distribution spatiale en fonction de nombre de sillons et la polarisation du laser excitant. La description du développement de cette technique a été très récemment acceptée pour publication [10]. L'intérêt de ces structures est l'utilisation de ces « phares » de lumière pour piéger et guider des atomes vers des surfaces avec une précision nanométrique.

Pendant l'étude de ces fentes « sillonnées » nous avons constaté que l'interprétation de base de l'origine de cette lumière n'était pas bien comprise. Au début de nos études nous avons pensé que la source laser excitait des ondes de surface dans un mode « guidé » de grande portée. Ces modes s'appellent des ondes de plasmons de surface. En fait notre intérêt était initialement attiré (en 2003) par l'annonce dans la littérature d'une augmentation d'intensité par un facteur de 1000 par ces plasmons de surface à travers des trous et des fentes sublongueur d'onde. Mais depuis lors une interprétation alternative était proposée qui supposait qu'un phénomène de diffraction était l'origine des ondes de surface, plutôt que l'excitation des modes de plasmons. Tenant compte du fait que ce serait quasiment impossible de correctement dessiner des structures avec des propriétés voulues pour la manipulation d'atomes froids si l'on ne comprenait pas le mécanisme de base, nous avons entamé une série de expériences testant ce modèle alternatif, qui s'appelle le modèle CDEW (composite diffracted evanescent wave). Le dispositif expérimental est montré dans la Figure 9.

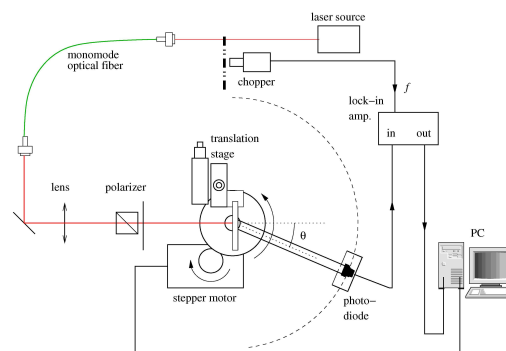


Figure 9 : Diagramme du goniomètre utilisé pour la mesure de la réponse optique des nanostructures fabriquées sur des couches minces métalliques et gravées par FIB.

Essentiellement on mesure des franges issues de l'interférence entre une onde directement propagée à travers la fente ou le trou et une onde de surface lancée par la fente ou par un sillon. La Figure 10 montre schématiquement le phénomène d'interférence.

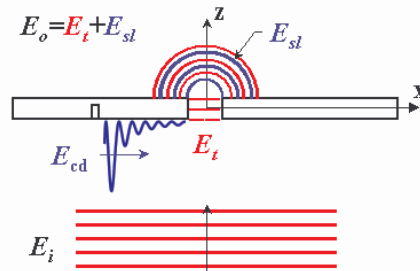


Figure 10 : Diagramme de l'excitation de nanostructure « couche métallique mince ». Une onde plane de la source laser arrive sur le plan d'entrée de la structure (cf. Figure 9). Une onde de surface est lancée du sillon vers la fente. L'onde de surface E_{cd} interfère avec l'onde E_i directement transmise, et les franges d'interférence sont détectées du côté de sortie.

La longueur d'onde et l'amplitude des franges sont mesurées en fonction de la distance entre le sillon et la fente (ou trou) dans une série de structures où cette distance est variée systématiquement. De ces données on peut tester des prédictions du modèle CDEW. La Figure 11 et la Figure 12 illustrent des données typiques. Chaque point correspond à une structure avec une distance entre le sillon et la « sonde », c'est à dire la fente ou le trou. Nous observons une onde amortie relativement rapidement dans la Figure 11 tandis que l'amortissement est beaucoup amoindri dans la Figure 12. L'explication complète n'est pas d'actualité mais nous pensons que les résultats de la Figure 12 montrent que la fente sonde interagit fortement avec le sillon lanceur tandis que le trou sonde correspondant aux données de la Figure 11 n'a qu'une interaction faible et perturbative.

Un article décrivant ces expériences est en cours de rédaction.

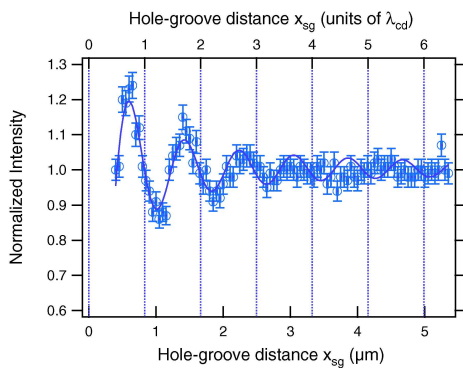


Figure 11 : Résultats de mesures de transmission pour une structure dotée d'un sillon (400 nm de largeur) et un trou sonde de 400 nm de diamètre.

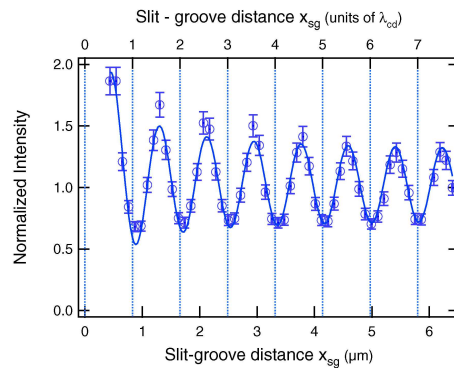


Figure 12 : Résultats de mesures de transmission pour une structure dotée d'un sillon (100 nm de largeur) et une fente sonde de 100 nm de largeur.

5.2.3. La source d'atomes froids

Nous avons développé un PMO-miroir (mirror-MOT) pour piéger et refroidir un ensemble d'atomes près de la surface d'un miroir. L'idée est d'utiliser une boule d'atomes de Cs refroidis comme le point de départ pour le chargement des pièges optiques.

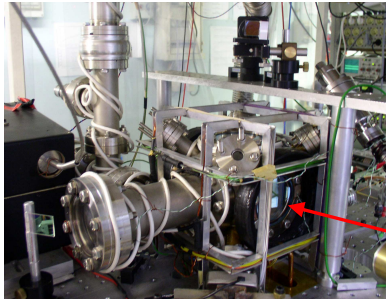


Figure 13 : Cellule UHV contenant le PMO-miroir de Cs. La flèche rouge indique la bride montrée en zoom dans la Figure

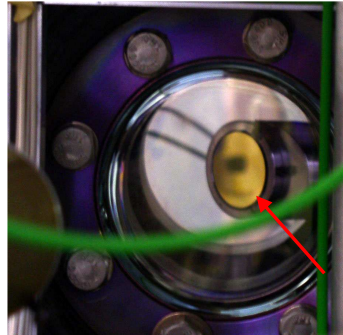


Figure 14 : La flèche rouge indique le miroir du PMO-miroir

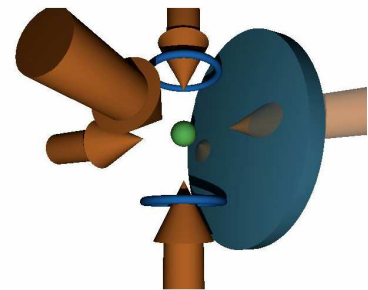


Figure 15 : Diagramme schématique du PMO-miroir, indiquant deux faisceaux lasers verticaux contre-propageants et deux faisceaux réfléchissants sur le miroir. La boule verte représente le nuage d'atomes froids.

En cours actuellement est l'introduction d'une étape de refroidissement supplémentaire, « refroidissement par bande latérale Raman » qui doit diminuer la température des atomes jusqu'à $\sim 1 \mu\text{K}$ et augmenter la densité par deux ordres de grandeur, jusqu'à $\sim 10^{13}$ atomes cm^{-3} . Avec la maîtrise de ce stade de refroidissement supplémentaire nous serons bien placés pour le piégeage d'atomes de Cs dans un réseau de potentiels optiques issus d'un réseau de nanostructures.

5.3. Perspectives

§ **Stylo Atomique :** La prochaine étape est de faire marcher la translation x-y et d'augmenter la vitesse d'écriture en focalisant le faisceau atomique par des lentilles magnétiques. Les préparations sont bien avancées sur les deux plans.

§ **Champs optiques nanostructurés :** Nous continuons d'approfondir nos connaissances de l'origine des ondes de surfaces et de bien distinguer un régime plasmon d'un régime diffractif. Le dessin de structures « actives » comme les lentilles diffractives de longueurs focales variables et contrôlées par de champs électriques, par exemple, est sur l'agenda pour la prochaine période.

§ **Piégeage d'atomes froids dans des réseaux optiques :** Les premières structures très simples, du genre « entonnoir » optique (cf. Figure 7 et 8) pour attirer des atomes vers la surface d'une façon contrôlée sont déjà programmées pour l'année 2005-2006. Après l'idée est de faire interagir et intriquer des atomes piégés et de développer des stratégies de dépôt atomique de précision à l'échelle nanométrique.

5.4. Les collaborations nationales et internationales

<i>Dates</i>	<i>Programme/ Financement</i>	<i>Correspondant</i>	<i>Université</i>	<i>Pays</i>	<i>Thème</i>	<i>Publis</i>
2002-présent	ACI-Nano 2002-2005	A. Dereux	Dijon	France	Nano/ Lumière/ Atomes	1, 3, 4, 5, 7, 8, 10
		T. Ebbesen	ISIS			
2002-présent		C. Girard	CEMES	France	Nano/ Lumière/ Atomes	1, 3, 4, 7
2002-2005	Nanocold EU-IST	D. Meschede	Bonn	Allemagne	Dépôt d'atomes	11,12
2002-2005	Nanocold EU-IST	E. Arimondo	Pise	Italie	Ecriture atomique	13
2002-2005	Nanocold EU-IST	E. Osterschulze	Kaiserslautern	Allemagne	Ecriture atomique	11,12
2002-présent	COFECUB	V. Bagnato	Sao Paulo	Brésil	Collisions Froides	
2002-présent		P. Julienne	NIST	USA	Collisions Froides	2, 6

5.5. Les soutiens financiers obtenus au cours des 4 années

Dates	Programme	Titre du Projet	Montant
09/2002-08/2006	FASTNet [HPRN-CT-2002-00304]	EU Research Training Network Coordinateur : J. Weiner	1.499,958 Euros dont 272.156 Euros pour Toulouse
01/2002-12/2005	NanoCold [IST-2001-32264]	EU IST-FET-NID Programme Coordinateur : F. Arimondo	1.888.800 Euros dont 423.400 Euros pour Toulouse
09/2003-08/2005	Région Midi-Pyrénées [SFC/CR 02/22]	Nano dépôts de structures actives par technologies d'atomes froids	41.820 Euros
09/2003-08/2005	ACI-Nanosciences-Nanotechnologies	Confinement et transport d'atomes froids par potentiels optiques.	68.000 Euros

5.6. Les Publications

5.6.1. Articles dans des revues avec comité de lecture

1. G. Lévêque, C. Meier, R. Mathevet, C. Robilliard, C. Girard, and J. C. Weeber, J. Weiner; *Phys. Rev. A* **65**, 053615–053624 (2002) “Atomic diffraction from nanostructured optical potentials”
2. J. Ramirez-Serrano, W. Degraffenreid, J. Weiner ; *Phys. Rev. A* **65**, 052719-052727 (2002) “Polarization-Dependent Spectra in the Photoassociative Ionization of Cold Atoms in a Bright Sodium Beam”.
3. G. Lévêque, C. Meier, R. Mathevet, C. Robilliard, C. Girard, and J. C. Weeber, J. Weiner; *Phys. Rev. E* **65**, 036701-036708 (2002) “Polarization state of the near optical field”
4. G. Lévêque, C. Meier, R. Mathevet, B. Viaris, J. Weiner, and C. Girard, J. Weiner; *Eur. Phys. J. AP* **20**, 219-226 (2002), “Designing experiments for the study of atom diffraction from nanostructured optical potentials”
5. R. Quidant, G. Lévêque, J. Weiner, J.-C. Weeber, Alain Dereux, and C. Girard; *Phys. Rev. B* **69**, 081402-081406 (2004), “Addressing and imaging microring resonators with optical evanescent light”
6. J. Ramirez-Serrano, W. DeGraffenreid, J. Weiner, E. Tiesinga, and P. S. Julienne; *Phys. Rev. A* **69**, 042708-042716 (2004), “Beam-loss spectroscopy of Cold Collisions in a Bright Sodium Beam”
7. R. Quidant, G. Lévêque, J.-C. Weeber, Alain Dereux, G. Colas des Francs, C. Girard, J. Weiner; *Nanotechnology* **15**, 1200-1210 (2004) “Modelling resonant coupling between microring resonators addressed by optical evanescent waves”
8. R. Quidant, G. Lévêque, J.-C. Weeber, A. Dereux, C. Girard, J. Weiner; *Europhys. Lett.* **66**, 785-791 (2004) “Frustrated energy transport through micro—waveguides decorated by gold nanoparticle chains”
9. C. O’Dwyer, G. Gay, B. Viaris de Lesegno, J. Weiner; *Langmuir* **20**, 8172-8182 (2004), “The nature of alkanethiol self-assembled monolayer adsorption on sputtered gold substrates”
10. K. Rubin, M. Eminyan, F. Perales, R. Mathevet, K. Brodsky, B. Viaris de Lesegno, J. Reinhardt, M. Boustimi, J. Baudon, J. C. Karam, J. Robert, "Atom interferometer using two Stern-Gerlach magnets", *Las-Phys-Lett.* 1(4), 184-93 (2004).
11. G. Gay, B. Viaris de Lesegno, R. Mathevet, C. O’Dwyer, J. Weiner ; *J. Appl. Phys. B* (sous presse, accepté) “Atomic fluorescence mapping of spatial optical intensity distributions issuing from nanostructured slits, milled into subwavelength metallic layers”
12. M. Mützel, M. Müller, D. Haubrich, D. Meschede, C. O’Dwyer, G. Gay, B. Viaris de Lesegno, J. Weiner, K. Ludolph, G. Georgiev, and E. Osterschulze; *J. Appl. Phys. B.* **80**, 941-944 (2005) “The Atom Pencil : Serial Writing in the Sub-Micrometer Domain”
13. C. O’Dwyer, G. Gay, B. Viaris de Lesegno, J. Weiner, K. Ludolph, G. Georgiev, and E. Osterschulze; *J. Appl. Phys.* **97**, 114309-114316 (2005); “Writing SAMs with Cs: optimization of atomic nanolithography imaging using self-assembled monolayers on Au”

14. C. O'Dwyer, G. Gay, B. Viaris de Lesegno, J. Weiner, A. Camposeo, F. Tantussi, F. Fuso, M. Allegrini, and E. Arimondo; *Nanotechnology* **16**, 1536-1541 (2005) "Atomic nanolithography patterning of submicron features: writing an organic self-assembled monolayer with cold, bright Cs atom beams"
15. G. Lévêque and R. Mathevet, "Blazed atom grating", *J. Opt. Soc. Am. B* **22**, 1554-1560 (2005)

5.6.2. Congrès avec acte

1. G. Gay, B. Viaris de Lesegno, R. Mathevet, H. J Lezec, J. Weiner, *Journal of Physics: Conference Series* **19**, 102-108 (2005); "Mapping of angular and spatial optical intensity distributions issuing from nanostructured slits, milled into subwavelength metallic layers"
2. C O'Dwyer , G Gay , B Viaris de Lesegno, J. Weiner, M M'utzet , D Haubrich , D Meschede , K Ludolph , G Georgiev and E Oesterschulze; *Journal of Physics: Conference Series* **19**, 109-117 (2005); "Advancing atomic nanolithography: cold atomic Cs beam exposure of alkanethiol self assembled monolayers"

5.6.3. Livres et sections de livres

1. Memory effects in atomic interferometry: a negative result, T. Durt, J. Baudon, R. Mathevet, J. Robert, B. Viaris de Lesegno, D. Aerts, M. Czachor dans *Probing-the-Structure of Quantum Mechanics. Nonlinearity, Nonlocality, Computation, Axiomatics*, édité par D. Aerts, M. Czachor, and T. Durt (World Scientific (Singapour), 2002), pp. 165-204.
2. *Light-Matter Interaction, Fundamentals and Applications* (Wiley & Sons, New York) John Weiner, Ping-Tong Ho ISBN: 0-471-25377-4 Hardcover 256 Pages, February 2003
3. *Cold and Ultracold Collisions in Quantum Microscopic and Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge UK), John Weiner, 300 pages, December 2003

5.6.4. Conférences invitées

1. International Conference on "Current Developments in Atomic, Molecular and Chemical Physics with applications", 20-22 March 2002, Delhi University, Delhi, India
2. Cool Interactions 2002, Workshop and Training School, "Interactions in Ultracold Gases from Atoms to Molecules", Internationales Wissenschaftsforum, Heidelberg 9-13 septembre, 2002.
3. Advanced School on Time and Frequency Metrology, São Paulo, Brazil, 5-15 octobre, 2003
4. Workshop on Mixtures of Ultracold Atoms, São Pedro, Brazil, 19-23 juillet 2004; satellite of ICAP XIX, International Conference on Atomic Physics, Rio de Janeiro-Brazil, 25-30 juillet 2004
5. NFO-8, Eighth International Conference on Near-field Nano Optics and Related Techniques, Séoul, Corée 5-9 septembre 2004

6. LAM-7, Seventh International Workshop on Physics and Modern Applications of Lasers, Douala, Cameroun, 6-10 décembre 2004
7. FRISNO-8, French-Israeli Symposium on Nonlinear and Quantum Optics, Ein Bokek, Israel, février 20-27 2005
8. CAMS-1, Conference on Atoms and Molecules near Surfaces, Heidelberg, Germany 4-8 avril 2005

5.6.5. Posters

1. ICAP XIX, International Conference on Atomic Physics, Rio de Janeiro-Brazil, 25-30 juillet 2004
2. COLOQ 9 Septembre 7-9, Dijon, France.

5.6.6. Communications orales et séminaires

1. Universität Würzburg, Department of Physics, 2 mai 2003.
2. Friedrich-Schiller-Universität Jena, Institute of Applied Physics, 5 mai 2003.
3. Università di Siena, Physics Department, 10 juin 2003
4. Universität Innsbruck, Institute of Experimental Physics, 19 juin 2003.
5. Seoul National University, Center for Near-Field Atom-Photon Technology, 2 septembre 2003; Corée du Sud
6. Korean University, Department of Physics, 3 septembre, 2003; Corée du Sud.
7. Université de São Paulo à São Carlos, IFSC, 8 octobre, 2003, Brésil
8. NIST, Gaithersburg, Physics Laboratory, 11 octobre, 2004, USA
9. Laboratoire Aimé Cotton, Orsay, France 21 avril, 2005 France
10. L'Ecole Normale Supérieure de Cachan, 25 avril, 2005 France
11. IFSC, Université de São Paulo, 18 mai, 2005, Brésil
12. Université de Danemark du Sud, Odense, 3 juin, 2005, Danemark

6. Spectroscopie moléculaire ultrarapide et Contrôle cohérent

6.1. Composition de l'équipe

Responsable :

Bertrand Girard (Professeur)

Permanents :

Valérie Blanchet (Chargée de recherche)

Béatrice Chatel (Chargée de recherche)

Mohamed Aziz Bouchène (Professeur, jusqu'au 08/2005– intégration à l'équipe théorique)

ATER, post-docs :

M./Mme	Prénom	Nom	Financement	Arrivée	Départ
Mr	Jérôme	Degert	ATER - UPS	09/2002	01/2003
Mr	Giorgio	Turri	COCOMO-european network	12/2002	02/2004
Mr	Peter	Zahariev	COCOMO-european network	04/2003	01/2004
Mr	Arnaud	Arbouet	Post-doc Fond Social Europeen	09/2004	09/2005
Mr	Jean-Christophe	Delagnes	ATER - UPS	09/2005	01/2006
Mr	Kevin	Rafael	Postdoc CNRS	10/2005	09/2006

Doctorants :

M./Mme	Prénom	Nom	Financement	Arrivée	Départ
Mr	Jérôme	Degert	MNERT	09/1999	01/2003
Mr	Jean-Christophe	Delagnes	MNERT	09/2002	10/2005
Mr	Antoine	Montmayrant	MNERT	09/2002	01/2006

Visiteur :

M./Mme	Prénom	Nom	Université	Financement	Arrivée	Départ
Mr	Malek	Ali	El Baath HOMS, Syrie	Univ. D'El Baath /UPS	01/2003 01/2004	02/2003 02/2004

Stagiaires (maîtrise, magistère, DEA, Ecoles, autres) :

M./Mme	Prénom	Nom	Université/Ecole	Niveau	Arrivée	Départ
Mlle	Marion	Jacquey	Univ. P. Sabatier	Maîtrise	04/2002	06/2002
Mr	Sébastien	Bonhommeau	Univ. P. Sabatier	Maîtrise	04/2002	06/2002
Mlle	Barbara	Lamory	Sup-Optique	2eme année	2002	08/2002
Mr	Jean-Baptiste	Sirven	Sup-Optique	3eme année	04/2003	08/2003
Mr	Alexandre	Bekstein	Univ. P. Sabatier	Licence	06/2003	07/2003
Mlle	Marie	Barthélémy	Univ. P. Sabatier	Licence	06/2003	07/2003
Mr	Julien	Courteaud	ENS-Cachan	Licence	06/2004	07/2004
Mlle	Marie-Emilie	Rouffet	Sup-Optique	3eme année	05/2005	08/2005
Mr	Faheel	Ather Hashmi	Univ. P. Sabatier	DEA	03/2005	07/2005
Mr	Gael	Duchoquet	Univ. P. Sabatier	DEA	03/2005	07/2005
Mr	Christophe	Hue	INSA-Toulouse	3 ^{eme}	06/2005	07/2005

6.2. Compte-rendu de l'activité scientifique

Les travaux menés dans l'équipe visent à étudier et contrôler la dynamique temporelle aux temps ultracourts d'atomes et molécules en phase gazeuse. Deux approches sont poursuivies en parallèle :

- Le contrôle cohérent consiste à mettre en oeuvre des processus d'interaction impliquant des impulsions ou séquences d'impulsions de forme de plus en plus complexes. Cette approche est en général menée dans des systèmes simples, de structure connue, l'objectif étant d'explorer les potentialités offertes par la complexité des impulsions. Elle nécessite de forts développements instrumentaux au niveau des sources laser : génération de profils temporels/spectraux (et éventuellement spatiaux) arbitraires et leur caractérisation.
- Lorsque l'échantillon gazeux est suffisamment dense, la modification de la dynamique des atomes s'accompagne d'une modification des propriétés temporelle et spectrale des impulsions excitatrices qui se propagent. Ainsi, on peut par effet rétro-actif contrôler le profil des impulsions en contrôlant la dynamique atomique.
- L'étude de dynamiques variées dans des systèmes moléculaires complexes. Ici, on cherche dans un premier temps à utiliser des impulsions de forme simple et on focalise les efforts de développements instrumentaux sur l'extension des gammes spectrales et temporelles de nos impulsions laser, la mise en oeuvre de détecteurs de particules chargées (spectromètre de photoélectrons – photoions). Les dynamiques étudiées concernent les noyaux seuls ou les électrons et les noyaux de façon couplée (conversion interne, couplage intersystème). Elles vont des simples mouvements monodimensionnels (vibration, (pré)dissociation), à des évolutions plus complexes (isomérisation, réactions concertées).
- Progressivement, les méthodes de contrôle seront appliquées à des systèmes de plus en plus complexes.

Ces différentes approches sont complémentaires, tant sur le plan conceptuel qu'instrumental. Des développements instrumentaux effectués pour un projet sont réutilisés pour un autre. Le spectromètre de photoélectrons – photoions peut autant servir aux études de dynamique moléculaire qu'à mettre en évidence la précession de spin dans des atomes. Par exemple, l'analyse de l'effet de la dérive de fréquence sur la dynamique pompe-sonde de l'acétylène a initié une étude poussée des transitoires cohérents dans un système plus simple, le rubidium.

Les principaux **développements instrumentaux** ont consisté, pour la *chaîne laser*, au développement d'un façonneur d'impulsions à cristaux liquides pixellisés. Avec 640 pixels phase et amplitude, il s'agit du record actuel avec cette technique. L'Amplificateur Paramétrique Optique non Colinéaire produisant des impulsions de 25 fs, plus courtes que les impulsions initiales (100 fs), dans une bonne fraction du spectre visible (500 – 700 nm) a été couplé avec le DAZZLER (Modulateur acousto-optique longitudinal, Fastlite) afin de réaliser un ensemble accordable dans le visible, comprimable et façonnable très versatile. Un *spectromètre de photoions / photoélectrons* basé sur la méthode d'imagerie de champ de vitesses a été développé. Un second détecteur sera bientôt construit afin de permettre des détections en coïncidence. L'ensemble de ces développements nous a permis de réaliser les expériences décrites par la suite. Dans le cadre du projet « Spectroscopies Optiques Ultimes » du CPER 2000-6, une nouvelle chaîne laser délivrant 3 mJ à 1 kHz (et 800 nm), avec des durées variables de 30 à 90 fs va être installée à l'automne 2005.

L'utilisation de dérive de fréquence est la situation la plus simple de mise en forme d'impulsions. En général, la dérivée seconde de la phase spectrale est le seul paramètre utilisé. Celui-ci permet d'obtenir une dérive linéaire de la fréquence laser en fonction du temps. Des

transitoires cohérents ont été observés dans la transition à un photon ($5s - 5p$) du rubidium. Ceux-ci résultent d'interférences entre l'excitation du système pendant et après la résonance. Une étude théorique poussée a été menée. L'analogie avec la diffraction de Fresnel (et les lentilles à zone de Fresnel) a permis de proposer une méthode de mise en forme de l'impulsion permettant de supprimer les interférences destructives. Cette méthode s'est révélée très sensible à la phase de l'impulsion laser et nous avons dérivé une méthode basée sur plusieurs mesures successives permettant de suivre l'évolution de l'état quantique interagissant avec l'impulsion laser et d'en déduire une mesure du champ de l'impulsion excitatrice. Nous avons aussi étudié les transitions à deux photons ($3s - 5s$ et $4d$) du sodium. Avec les états intermédiaires $3p_{1/2}$ et $3p_{3/2}$ proches de la mi-distance, ce système permet de fournir un modèle **d'échelle de niveaux**. Les **transitions à deux photons** peuvent être excitées soit par des chemins séquentiels, soit par des chemins "directs" non-résonnants. En champ lumineux faible ou intermédiaire, des interférences entre ces différents chemins d'excitation apparaissent. Celles-ci peuvent être observées en faisant varier la dérive de fréquence des impulsions. Des applications à la réalisation d'une **étoile laser artificielle polychromatique** sont en cours d'étude, en liaison avec J.P. Pique. Enfin, de façon inattendue, la généralisation de cette approche a permis de démontrer la possibilité de factoriser des nombres.

Les études de propagation dans des milieux atomiques (transition $S_{1/2} \rightarrow P_{1/2}$ du rubidium) ont mis en évidence des processus physiques nouveaux dans des expériences pompe-sonde ou l'impulsion pompe est intense, la sonde faible et les polarisations linéaires et croisées. Plus précisément, l'analyse des résultats montre l'apparition et le rôle joué par les interférences à des degrés divers. En premier lieu, il y a **l'interférence entre les chemins quantiques d'absorption et d'émission stimulée** du champ de la sonde dans le système atomique dont les niveaux sont modifiés par les déplacements lumineux dus à la pompe. Ces interférences sont responsables de la modulation de l'énergie de l'impulsion sonde en sortie de l'échantillon. Il y a aussi l'interférence entre le champ incident de la sonde et le champ rayonné, responsable de la modification après propagation de la forme temporelle de l'impulsion sonde. Cette modification peut être contrôlée en variant la phase relative entre la pompe et la sonde.

Les études **pompe-sonde** moléculaires sont typiquement les dynamiques de paquets d'ondes vibrationnelles (I_2) et les cohérences rotationnelles ($C_{10}H_8$), les relaxations vibrationnelles (Na_3F), électroniques (TTF et $C_{10}H_8$), et les couplages non-adiabatiques photodissociatifs (CH_3Br). Une bonne partie de ces travaux a été menée dans le cadre de collaborations locale ou extérieures, ponctuelles ou correspondant à des séjours prolongés.

Les **projets de recherches** se poursuivent dans les directions déjà tracées. Les développements instrumentaux vont concerner les extensions des gammes spectrales disponibles vers l'UV puis le VUV. Les impulsions UV seront façonnées. Les atomes serviront là encore de systèmes modèles dans lesquelles seront testées les nouvelles idées. Toutefois, les applications à des systèmes moléculaires devraient occuper une place prépondérante.

6.2.1. Instrumentation

6.2.1.1. Développement de sources accordables

Participants : AA, BC, coll Amplitude Technologie

Jusqu'en 1999, nous ne disposions à Toulouse que d'une source à 800 nm, 1 mJ, 1 kHz, 110 fs ainsi que d'un amplificateur paramétrique optique proche Infra rouge. Depuis 1999, le groupe dispose d'amplificateurs paramétriques non colinéaires (NOPA) faits maison qui permettent d'étendre la gamme de longueur d'onde dans le visible (500-700 nm) et d'obtenir des impulsions très courtes (30 fs). Les diverses expériences entreprises, utilisant les

NOPA en particulier pour générer des longueurs d'onde UV, ont montré que l'énergie obtenue était un peu limitée. Diverses pistes qui permettraient d'augmenter l'énergie en sortie de ces amplificateurs, sans en perdre les propriétés sont étudiées. La première consiste à construire un troisième étage d'amplification, la seconde serait de tirer partie de la technique dite OPCPA pour amplifier nos impulsions visibles en utilisant un laser de pompe ns (l'impulsion fs à amplifier est alors préalablement étirée jusqu'à une durée égale à celle de la pompe). La première piste donne des résultats intéressants mais pas tout à fait assez énergétiques (environ 20 μJ dans le visible). Cependant ces résultats ont permis de réaliser dans l'année 2005 une prestation de service pour la société Amplitude Technologies afin de délivrer une source courte UV accordable obtenue par somme de fréquence entre la sortie d'un OPA et le fondamental (800 nm). D'autre part un projet de collaboration avec cette même société sur le pompage d'un NOPA par une pompe courte est envisagé.

6.2.1.2. Façonneur d'impulsions

6.2.1.2.1. Système à cristaux liquides programmables

Participants = AM, BC

Publication = [J20]

Afin de pouvoir fournir une impulsion « optimale », qui n'est pas nécessairement une impulsion gaussienne de durée minimale, il est indispensable de pouvoir contrôler les caractéristiques temporelles de notre impulsion, à savoir sa phase et son amplitude. Pour ce faire nous avons construit un dispositif de mise en forme d'impulsions basé sur l'insertion dans le plan de Fourier d'une ligne à dispersion nulle d'un double dispositif à cristaux liquides pixellisés.⁴⁵ Ce travail s'est étalé sur une partie de l'année 2002. En effet nous souhaitions avoir la possibilité de moduler la phase et l'amplitude du champ tout en ayant le plus grand nombre de pixels existant à savoir 640 pixels. Nous avons donc travaillé en lien direct avec la compagnie Jenoptik pour adapter leur système purement en phase.

Ainsi l'originalité de notre montage est d'allier un système à cristaux liquides à grand nombre de pixels avec une ligne 4f de très grande dispersion ce qui nous permet une résolution de 0.06 nm/pixel. Les premiers résultats utilisant ce dispositif datent du mois de mars 2003. La Figure 1 montre quelques réalisations expérimentales.

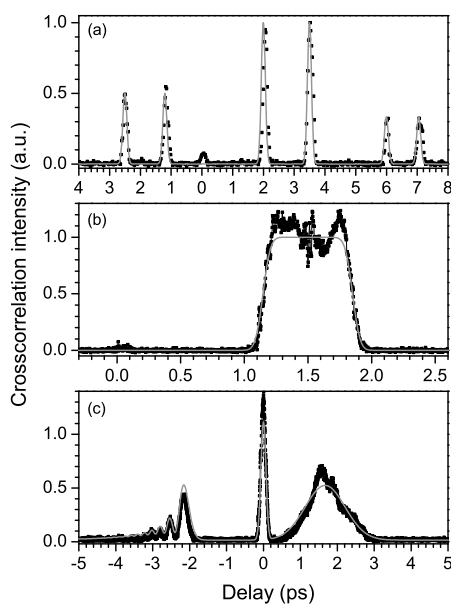


Figure 1 : Différents façonnages obtenus avec le dispositif de 2*640 pixels.

- a. Une séquence d'impulsion,
- b. Une impulsion carrée,
- c. Une impulsion avec une forte phase cubique, une impulsion limitée par transformée de Fourier, une impulsion à dérive de fréquence.

⁴⁵ A. M. Weiner, D. E. Leaird, J. S. Patel, and J. R. Wullert II, I.E.E.E. J. Quant. Electronics 28, 908 (1992).

Cet ensemble permet de travailler les impulsions sortant directement de l'amplificateur régénératif à 800 nm. Un enjeu très important est de pouvoir disposer de ces mises en forme dans d'autres gammes spectrales. Une des pistes intéressantes est l'étude du transfert de la phase à travers des processus non linéaires, qui a déjà été démontré pour des mises en forme simples mais semble plus difficile à généraliser dans les cas complexes.

6.2.1.2.2. DAZZLER utilisé dans le visible

Participants = AM, AA, **BC**, **BG**, coll D. Kaplan (Fastlite), B. Whitaker (Leeds)

Publication = [J23]

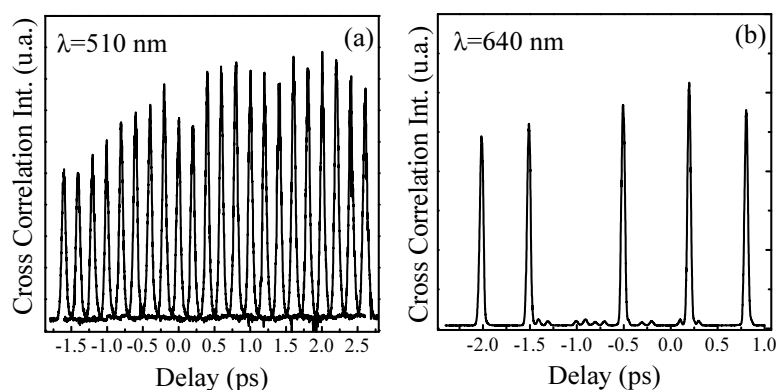


Figure 2 : Différentes mises en forme obtenues dans le visible avec le Dazzler

Deux campagnes d'expériences ont été réalisées avec succès aux mois d'avril 2004 puis octobre 2005 sur la mise en forme et la compression du continuum de lumière blanche ou de la sortie du NOPA en utilisant un Dazzler (acousto-optique programmable) en collaboration avec Daniel Kaplan de la compagnie Fastlite. Pour la première fois a été démontrée la possibilité de faire de la compression et du façonnage d'impulsions visibles accordables avec un acousto-optique programmable (cf Figure 2).

6.2.2. Dynamique moléculaire

Les phénomènes étudiés sont typiquement les dynamiques de paquets d'ondes vibrationnelles (I_2) et les cohérences rotationnelles ($C_{10}H_8$), les relaxations vibrationnelles (Na_3F), électroniques (TTF et $C_{10}H_8$), et les couplages non-adiabatiques photodissociatifs (CH_3Br). Les signaux analysés sont des signaux d'ion ou de fluorescence (I_2), issus d'excitation ns (Na_3F et CH_3Br) ou fs (I_2). Les études résolues en temps impliquent très souvent des développements instrumentaux notamment en optique, non détaillés ici. Ces études apparaissent ici dans l'ordre chronologique. Les travaux sur la dynamique de relaxation des états très excités de l'acétylène résumés dans le précédent rapport d'activité ont été publiés courant 2003 [J13], [J14]. Il en va de même des études théoriques de la dynamique d'agrégats en champ intense [J9] et de l'étude expérimentale de la dynamique non adiabatique en champ intense [J7],

6.2.2.1. Halogénure d'Alcalin : Na_3F

Participants = **VB**, **BL** en collaboration avec JM L'Hermite, A. Lepadellec, P. Labastie (LCAR), C. Meier, F. Spiegelman, G. Durand, M.C. Heitz (LPQ)

Publication = [J16]

Les études de dynamique d'agrégats par spectroscopie résolue en temps sont encore très peu nombreuses et difficiles principalement du fait de la présence de plusieurs isomères. En collaboration avec l'équipe « agrégats » du laboratoire CAR et le soutien théorique du LCAR et LPQ, la dynamique de relaxation de Na_3F a été étudiée par photoionisation résolue en temps. L'efficacité d'ionisation ainsi que l'absorption ont été étudiées respectivement par

spectroscopie UV et par photodéplétion. Na₃F a principalement deux formes isomériques : la structure 3D quasi-pyramidale C_{3v} et la structure losange quasi-plane C_{2v} dans laquelle 80% de Na₃F est formé. La courbe de photoionisation marque deux seuils en bon accord avec les potentiels d'ionisation verticaux calculés pour ces deux isomères.⁴⁶ Le schéma pompe-sonde femtoseconde implique deux impulsions dans le visible (issues chacune d'un NOPA) avec une pompe excitant la seconde bande d'absorption de l'isomère C_{2v}. Afin d'éviter la perte d'information par dissociation de l'ion parent, l'impulsion sonde photoionise au seuil vertical. Ioniser près du seuil permet d'être sélectif en géométrie et ainsi d'observer des mouvements de paquet d'onde nucléaire.⁴⁷ Avec un fort contraste, cette expérience a ainsi révélé une dynamique de relaxation vibrationnelle très complexe, dont l'interprétation a été confirmée par des calculs de dynamique de paquet d'ondes.⁴⁸ La période amortie de 390 fs correspond au double de celle du pliage de Na₂F. L'isomère C_{2v} est électroniquement très proche de Na₂F+Na. Lorsqu'un mouvement de pliage est initié sur la partie Na₂F, l'atome de fluor s'approche du 3^{ème} atome de sodium lors d'un pliage sur deux. La relaxation vibrationnelle correspond à une vibration du F vers le 3^{ème} atome de sodium s'amortissant en transférant de l'énergie vers les modes de Na₃. Plus de détails sont donnés dans le rapport d'activité du groupe agrégats.

6.2.2.2. Dynamique de relaxation électronique du tétrathiafulvalène

Participants = JCD, GT, VB

Le tétrathiafulvalène (C₆S₄H₄ - TTF), composé hautement conducteur et pouvant donner ou accepter des électrons lorsqu'il est combiné à des molécules telles que le TCNQ ou des fullerènes, semble prometteur pour la réalisation de matériaux photoactifs à rapide transfert de charge. La haute conductivité de cet organo-métallique dans des composés supraconducteurs est supposée être favorisée par des couplages électron-vibration impliquant entre autres la double liaison centrale C=C du TTF. Cette molécule possède une force d'oscillateur très importante (entre 300-320 nm) et un seuil d'ionisation bas (6.92 eV), compatible avec l'accordabilité de la chaîne laser actuelle. L'assignement électronique de la forte bande d'absorption observée entre 300-320 nm fait encore l'objet de discussion : soit deux états de valence π^* (1¹B₂ et 2¹B₂)⁴⁹, soit une structure vibrationnelle associée principalement aux liaisons CS d'un même état électronique 1¹B_{1u}.⁵⁰ Pour clarifier ce point, nous avons étudié la dynamique de relaxation électronique à travers toute cette bande par photoionisation résolue en temps. L'accordabilité dans l'UV de l'impulsion pompe est obtenue via un mélange de fréquence (BBO) entre le fondamental de la chaîne (~800 nm) et la sortie d'un NOPA. L'énergie en sortie est typiquement de 2-3 μ J/impulsion. *Cette énergie relativement faible pour des expériences en phase gazeuse devrait facilement doubler avec la nouvelle chaîne laser installée en octobre 2005. Ce paramètre ne devrait plus être le principal facteur limitant de ce type d'expérience.* L'impulsion sonde est soit la 3^{ème} harmonique du fondamental soit simplement la seconde harmonique, permettant ainsi d'accéder soit aux deux premiers états de l'ion, soit seulement au premier. La 3^{ème} harmonique et l'impulsion pompe sont corrélées sur 300 fs. Sur toute la gamme 300-320 nm la dépendance temporelle de l'ion parent décroît exponentiellement sur un temps typique de

⁴⁶ G. Durand, M. C. Heitz, F. Spiegelman, C. Meier, R. Mitric, V. Bonacic-Koutecky and J. Pittner, J. Chem.Phys. **121**, 9898 (2004).

⁴⁷ S. Vajda et al., Phys. Rev. Lett. **89** (21), 213404 (2002).

⁴⁸ M. C. Heitz, G. Durand, F. Spiegelman, C. Meier, R. Mitric and V. Bonacic, J. Chem.Phys. **121**, 9906 (2004).

⁴⁹ R. Andreu, J. Garin and J. Orduna, Tetrahedron **57**, 7883 (2001).

⁵⁰ R. Pou-Amerigo, P. M. Viruela, R. Viruela, M. Rubio and E. Orti, Chem. Phys. Lett. **352**, 491 (2002).

400±25 fs : quelle que soit la nature des états, la relaxation électronique semble identique. Pourtant, lorsque la 2nd harmonique est utilisée comme sonde (seul l'état fondamental de l'ion est accessible), la dépendance temporelle est une biexponentielle décroissant sur 100 fs et 1 ps. Ce dernier schéma de sonde sera repris à partir de la nouvelle chaîne en suivant également la dépendance temporelle des photoélectrons.

6.2.2.3. Cohérence rotationnelle et Relaxation électronique dans l'azulène.

Participants = GT, VB, BC, BG

Une cohérence rotationnelle peut être induite optiquement par une transition électronique dont le moment dipolaire électrique est parallèle ou perpendiculaire (selon la nature de la transition) à la polarisation de l'impulsion pompe. Ainsi cette dernière excite préférentiellement une certaine classe de molécules. Ceci est notamment le cas pour les états électroniques S₂ et S₄ de l'azulène dont les moments dipolaires sont parallèles au grand axe z de symétrie.⁵¹ Cet alignement moléculaire ne relaxe que sous l'effet de la rotation moléculaire. Cette relaxation peut être détectée si la transition sonde est également sensible à cet alignement, soit dans notre cas si la probabilité d'ionisation est sensible à la polarisation. Dans le cas d'une ionisation à un photon en absence d'autoionisation et sur un système aussi complexe que l'azulène, l'efficacité d'ionisation est en général indépendante de la polarisation. Au contraire pour des transitions sonde multiphotoniques, si parmi les états intermédiaires une transition dipolaire domine, l'alignement peut alors être détecté.

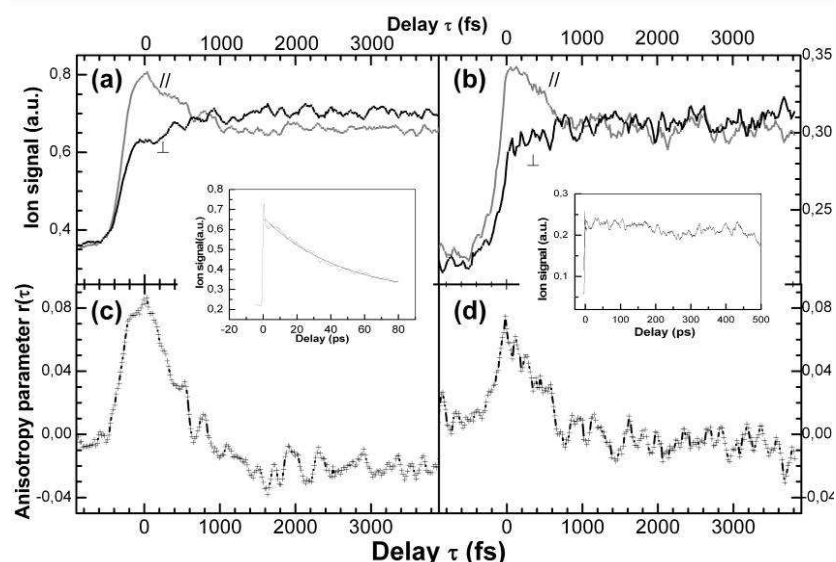


Figure 3(a-b): Signal d'ionisation pompe-sonde pour des polarisations parallèles (courbes grises) et perpendiculaires (courbes noires). Les inserts sont les mêmes acquisitions aux temps longs. (c-d): Mesure d'anisotropie correspondante. (a) et (c): Excitation à 266 nm (~S₄). (b) et (d): état S₂ excité à 307 nm.

L'azulène est l'un des rares systèmes violant la loi de Kasha avec une émission de fluorescence émise principalement depuis le second état excité S₂ et non le premier. L'état électronique de plus grand moment dipolaire est l'état S₄. Cette étude porte sur la cohérence rotationnelle, mais également sur la relaxation électronique de l'état S₄.

La cohérence rotationnelle a d'abord été détectée en excitant vers l'état S₂ ($\lambda_{\text{pompe}} < 350$ nm) avec une ionisation nécessitant deux photons de 400 nm (Figure 3-b). A partir du signal d'ion enregistré en polarisations pompe-sonde parallèle ($I_{\parallel}(\tau)$) puis croisée ($I_{\perp}(\tau)$), le paramètre d'anisotropie peut être calculé : $r(\tau) = \frac{I_{\parallel}(\tau) - I_{\perp}(\tau)}{I_{\parallel}(\tau) + 2I_{\perp}(\tau)}$ (Figure 3-d). La valeur maximale de $r(\tau)$

seulement de 0.08 indique que les états intermédiaires participant à la transition d'ionisation à deux photons sélectionnent légèrement les molécules dont l'axe z est resté parallèle à la

⁵¹ M. Fujii, T. Ebata, N. Mikami and M. Ito, "Electronic spectra of jet-cooled azulene," Chem. Phys. 77, 191-200 (1983)

polarisation de la pompe. Si la corrélation temporelle pompe-sonde (ici 300 fs) est inférieure à la période rotationnelle, le minimum d'anisotropie pour une rotation autour d'un seul axe moléculaire correspond simplement à la période rotationnelle autour de cet axe.⁵² Pour un moment d'inertie⁵³ $I_z = 295.38 \times 10^{-47}$ kg m² (sachant que les moments autour des deux autres axes sont deux à trois fois plus importants) et en supposant une température de $T_{rot}=80$ K, la

période rotationnelle de la molécule libre est de $P_{rot} = \sqrt{\frac{I}{kT_{rot}}} = 1.6$ ps. Ceci est en bon accord

avec le minimum observé sur la Figure 3-d. Cette étude de cohérence rotationnelle remet en cause l'interprétation faite dans le groupe d'A. Zewail des décroissances rapides de 350 fs observées depuis l'état S_2 .⁵⁴

De façon plus surprenante cette récurrence rotationnelle est également observée lorsque la molécule est à présent excitée vers l'état S_4 (pompe à 266 nm -Figure 3-a-c). En effet, l'ionisation depuis S_4 ne requiert énergétiquement qu'un seul photon de 400 nm, n'impliquant a priori aucune sensibilité à l'anisotropie d'excitation. Cette sensibilité à l'anisotropie d'excitation et à la cohérence rotationnelle implique soit la présence d'un état autoionisant de moment dipolaire aligné selon z, soit une relaxation rapide vers l'état S_2 . Dans ce dernier cas, l'énergie vibrationnelle accessible par ionisation à un photon est peu favorable et implique alors l'absorption d'un second photon au-dessus du seuil d'ionisation avec un moment dipolaire de transition aligné selon z. Cependant l'excitation vers S_4 révèle une décroissance exponentielle lente (~45 ps - insert de Figure 3-a) difficilement compatible avec cette seconde hypothèse. Ce lent temps de décroissance est lui-même surprenant compte-tenu de la large bande d'absorption. *Cette relaxation lente, ainsi que la capacité à observer des récurrences rotationnelles depuis l'état S_4 , seront à nouveau étudiés en regardant cette fois la dépendance temporelle des photoélectrons.*

6.2.2.4. Observation d'ondes stationnaires transitoires dans I_2

Participants = BG, C. Meier (LCAR – Théorie), K. Ohmori, H. Katsuki, H. Chiba (IMS Okasaki)

Publication = [J27]

L'évolution d'un paquet d'onde vibrationnel dans un puits de potentiel anharmonique conduit à un étalement puis un émiettement du paquet d'ondes. En conséquence du nombre fini de niveaux constituant le paquet d'ondes, l'évolution doit être périodique et au bout d'un certain temps de « renaissance » T_R , le paquet d'onde se reconstitue, identique à sa forme initiale. A des fractions T_R / p de ce temps de renaissance (« temps de renaissance partielle »), la fonction d'onde est constituée de p paquets d'ondes qui se succèdent et se croisent⁵⁵. Ces paquets d'onde sont mutuellement cohérents et conduisent à des interférences multiples lorsqu'ils se croisent et se chevauchent. Ainsi, au demi-temps de renaissance, deux paquets d'onde sont présents et oscillent en opposition de phase. A chaque croisement, un réseau d'interférences apparaît transitoirement. Contre toute attente, cette « onde stationnaire transitoire » dure suffisamment (de l'ordre d'un quart de période de vibration) pour pouvoir

⁵² A. P. Blokhin, M. F. Gelin, E. V. Khoroshilov, I. V. Kryukov and A. V. Sharkov, "Dynamics of Optically Induced Anisotropy in an Ensemble of Asymmetric Top Molecules in the Gas Phase," *Opt. Spectrosc.* **95**, 346-352 (2003)

⁵³ I. Bandyopadhyay, "How different is azulene from tropylium cation and cyclopentadienyl anion? A force field and vibrational study," *Theochem J. Mol. Struct.* **618**, 59-64 (2002).

⁵⁴ E-G Diau, S De Feyter, AH Zewail, "Direct observation of the femtosecond nonradiative dynamics of azulene in a molecular beam: The anomalous behavior in the isolated molecule". *J. Chem. Phys.* **110**, 9785-8 (1999)

⁵⁵ I. S. Averbukh and N. F. Perelman, Fractional revivals: Universality in the long-term evolution of quantum wave packets beyond the correspondence principle dynamics, *Phys. Lett. A* **139**, 449 (1989).

être observée comme l'ont démontré récemment C. Meier et ses collaborateurs⁵⁶. De plus, entre deux croisements successifs, les ondes stationnaires sont alternées (maxima et minima s'inversent) ce qui donne une signature caractéristique très claire. Ainsi, si la fenêtre d'observation (dans un schéma pompe-sonde) se trouve sur l'un des points de rebroussement, on voit passer deux paquets d'onde par période⁵⁷. Si par contre la fenêtre d'observation se trouve quelque part sur le parcours des paquets d'onde, on voit le réseau d'ondes stationnaires, avec un maximum par période si la fenêtre d'observation est suffisamment étroite et centrée sur une ligne d'extréma, et au contraire deux pics par période dans les autres cas. L'observation de cette dynamique a été effectuée dans le groupe de K. Ohmori qui possède les sources lasers ayant les caractéristiques requises. Dans un deuxième temps, nous avons recréé cette situation à l'aide d'une paire d'impulsions décalées d'une demi-période de vibration et créant directement la paire de paquets d'onde. Ici, suivant la phase relative, il a été possible de reconstituer les structures observées au temps de demi-renaissance, mais aussi d'autres structures qui ne peuvent pas apparaître lors de l'évolution d'un paquet d'onde unique dans un potentiel anharmonique.

Ces travaux soulignent une fois de plus que l'interprétation d'un signal pompe-sonde ne peut se faire qu'en prenant explicitement en compte la sonde qui peut modifier complètement la dynamique observée. Ils repoussent la limite de résolutions spatiales (1 pm) et temporelles (80 fs) obtenues simultanément. Ils offrent des perspectives intéressantes en terme de contrôle précis de fonctions d'ondes que nous comptons exploiter dans le futur.

6.2.2.5. Dynamique non-adiabatique de photodissociation de CH₃Br et de CH₃N₃

Participants = VB en collaboration avec A. Wodtke et Peter. C. Samar

Publication = [J24]

Ces travaux ont été réalisés pendant les trois mois passés dans le département de chimie et biochimie de l'Université de Santa-Barbara (UCSB) au sein du groupe du Pr. Alec Wodtke.

Récemment a été formé N₃-cyclique depuis la photodissociation de ClN₃.⁵⁸ Ce composé relativement instable est prometteur en terme de propulsion puisque capable d'emmagasiner de l'énergie dans un petit volume avec une explosion produisant principalement du N₂. Toutefois reste-t-il à produire N₃ en quantité et à partir de n'importe quel composé. Nous avons ainsi essayé de détecter la formation de N₃ à partir d'azide de méthyle en analysant l'énergie de translation des photofragments CH₃. La seconde bande d'absorption de CH₃N₃, centrée à 215 nm porte la plus grande force d'oscillateur. Les fragments CH₃ ionisés par une transition à 3 photons résonante (REMPI) sont collectés dans un imageur de vitesse.⁵⁹ Le REMPI résonant à 2 photons avec l'état de Rydberg $3p\ ^2A_2$ permet ainsi de sélectionner l'énergie interne du CH₃ détecté. Le spectre de masse a révélé la principale voie connue de photodissociation (CH₃N+N₂) mais aucune présence de CH₃. Afin de détecter cette voie de dissociation, une étude a été réalisée au synchrotron de Taiwan : une impulsion ns excite CH₃N₃ dont les produits de dissociation sont détectés par ionisation VUV synchrotron. Ceci a révélé une faible présence de N₃ pour $\lambda < 193$ nm et permis de déterminer l'énergie de dissociation de N₃+CH₃. Ces travaux pourront également

⁵⁶ T. Lohmuller, V. Engel, J. A. Beswick, and C. Meier, Fractional revivals in the rovibrational motion of I₂, J. Chem. Phys. **120**, 10442 (2004).

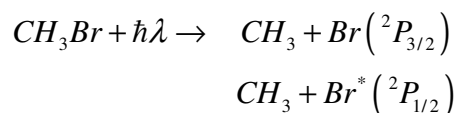
⁵⁷ C. Nicole, M. A. Bouchene, C. Meier, S. Magnier, E. Schreiber, and B. Girard, Competition of different ionization pathways in K₂ studied by ultrafast pump-probe spectroscopy: A comparison between theory and experiment, J. Chem. Phys. **111**, 7857 (1999).

⁵⁸ N. Hansen et al., Photodissociation dynamics of ClN₃ at 203 nm, Chem. Phys. Lett. **368**, 568 (2003).

⁵⁹ A. T. J. B. Eppink and D. H. Parker, Rev. of Scient. Inst. **68**, 3477 (1997).

avoir un impact sur les études de l'atmosphère de Titan contenant du CH_3N_3 estimé à <5.4 ppb.

Une seconde étude a porté sur la dynamique non-adiabatique dans la bande dissociative A du CH_3Br . Du fait du couplage spin-orbite, cette bande se décompose en trois états 3Q_1 , 3Q_0 et 1Q_1 . Au contraire de CH_3I dont les nombreuses études ont montré l'omniprésence de 3Q_0 , l'absorption dans CH_3Br se caractérise par au moins deux forces d'oscillateur associées à 3Q_0 et 1Q_1 . La dissociation très rapide mène vers deux voies de dissociation :



En symétrie C_{3v} , 3Q_0 et 1Q_1 corrélient adiabatiquement vers Br^* et Br respectivement, séparés en énergie par le spin-orbite comme clairement illustré sur la Figure 4. L'anneau central correspond au canal Br^* et le plus externe au canal Br . Ces deux transitions sont facilement identifiables : les moments dipolaires de 3Q_0 et 1Q_1 sont respectivement parallèle et perpendiculaire.

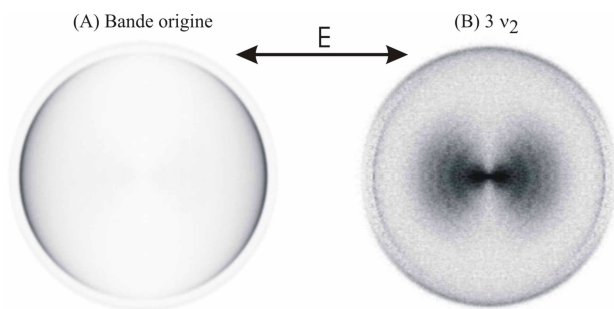


Figure 4 : Image de fragment méthyle détecté par REMPI en sélectionnant les fragments émis dans (A) la bande origine et (B) avec trois quanta dans le mode parapluie. La flèche indique la polarisation du laser de photodissociation.

La détection, tout comme pour N_3CH_3 , est principalement l'imagerie des fragments CH_3 sélectionnés en énergie interne par REMPI, ainsi que celle des fragments Br . Nous avons ainsi déterminé la distribution vibrationnelle de chaque voie de dissociation et en fonction de l'énergie interne la probabilité de couplage non-adiabatique de 3Q_0 vers 1Q_1 et vice-versa à partir de l'anisotropie des émissions des fragments. Lors de la photodissociation, le CH_3 passe d'une forme pyramidale à une forme quasi plane. De ce fait les fragments sont surtout excités dans le mode parapluie (ν_2). Toutefois cette excitation vibrationnelle est plus importante pour la dissociation conduisant vers Br que pour Br^* . Il en est de même pour la rotation. La Figure 4 montre le renversement de distribution avec pour la bande origine un anneau central plus intense caractérisé par une transition parallèle, tandis que lorsque 3 quanta sont excités l'anneau externe est le plus intense avec une transition perpendiculaire. La composante centrale structurée de l'image (B) correspond à des contributions dissociatives de CH_3Br^+ faisant apparaître un quantum d'énergie de 1400 cm^{-1} correspondant au mode parapluie de CH_3^+ . Cette collaboration avec l'UCSB est amenée à se poursuivre.

6.2.3. Contrôle dans des systèmes simples

Les expériences de contrôle cohérent ont permis de mettre en évidence des effets de l'interaction d'impulsions de formes simples (dérive de fréquence, saut de phase spectrale, séquence d'impulsions) avec des systèmes atomiques pris comme modèle. Dans les transitions à un photon, le comportement temporel a été observé et manipulé. Une méthode de mesure

« en temps réel » de l'état quantique excitée a été démontrée. Elle permet de déterminer la forme (amplitude et phase) de l'impulsion lumineuse excitatrice. Dans les transitions à deux photons avec état intermédiaire résonnant, des interférences entre processus d'excitation séquentielle et directe ont été mis en évidence. Des applications à l'excitation du sodium stratosphérique (étoile laser artificielle) et à la factorisation de nombres sont en cours d'étude.

Certaines études décrites dans le précédent rapport à 4 ans ont été publiées dans la période examinée. Des prolongements sont envisagés mais ne sont pas actuellement une priorité. Il s'agit d'une part des études de contrôle de figures d'interférence atomique dans la prédissociation de NaI [J10]. Ces études théoriques effectuées en collaboration avec C. Meier (LCAR) montrent comment un tel système quantique pourrait conserver la mémoire de la séquence d'impulsions utilisée pour le manipuler. La réalisation expérimentale est délicate dans NaI (problème de résolution énergétique) et une autre molécule candidate doit être identifiée. D'autre part, des travaux d'interférences de paquets d'onde ont été achevés, soit dans des états liés d'atomes [J1] [J3], soit dans des états du continuum d'ionisation [J6]. Enfin, en collaboration avec N. Vitanov, nous avons expliqué les expériences de centrifugeuse rotationnelle de P. Corkum⁶⁰ par une succession de transitions Raman au cours desquelles augmente le moment cinétique de la molécule [J18].

6.2.3.1. Observation et manipulation de transitoires cohérents dans le rubidium

6.2.3.1.1. Observation des transitoires

Participants = SZ, SS, JD, BC, MAB, VB, BG

Les impulsions à dérive de fréquence constituent un outil privilégié permettant de faire varier les caractéristiques temporelles d'une impulsion laser. Dans les transitions à un photon, la population atteinte à la fin de l'impulsion est indépendante de la forme de celle-ci. Par contre le régime transitoire peut être fortement modifié. Nous avons observé des transitoires cohérents⁶¹, bien connus en RMN ou en radiofréquence⁶², mais jamais vus à notre échelle de temps.

L'excitation de la transition à un photon ($5s-5p_{1/2}$) du rubidium nous a permis de mettre en évidence d'une part l'augmentation brutale de population de l'état excité au moment du passage par la résonance, et d'autre part des oscillations se produisant après le passage par cette résonance. Ces oscillations résultent d'une interférence entre la population portée dans l'état excité après la résonance (nulle en moyenne, ou à la fin de l'impulsion, mais non nulle à un instant donné) et celle excitée pendant le passage par la résonance. En termes classiques, le dipôle atomique excité continue à osciller à sa fréquence propre qui bat avec la fréquence du laser qui dérive progressivement. Ceci explique l'augmentation de la fréquence de l'oscillation observée. Par contre, l'excitation avant la résonance ne produit aucune oscillation car elle s'ajoute à une population initiale nulle. Ce comportement s'explique très simplement en traçant dans le plan complexe l'amplitude de population. Une spirale de Cornu apparaît alors.

⁶⁰ D. M. Villeneuve, S. A. Aseyev, P. Dietrich, M. Spanner, M. Y. Ivanov, and P. B. Corkum, Forced Molecular Rotation in an Optical Centrifuge, **Phys. Rev. Lett.** **85**, 542 (2000).

⁶¹ S. Zamith, J. Degert, S. Stock, B. de Beauvoir, V. Blanchet, M. A. Bouchene, and B. Girard, Observation of Coherent Transients in Ultrashort Chirped Excitation of an undamped Two-Level System, **Phys. Rev. Lett.** **87**, 033001 (2001).

⁶² Macke, B. and P. Glorieux, Transient Stark effects on a microwave line, **Chem. Phys. Lett.** **14**, 85-88 (1972).

Différents régimes ont été étudiés (variation de l'écart à résonance, effets de saturation, tant expérimentalement que théoriquement). Nous avons enfin démontré théoriquement que les transitoires cohérents ne dépendent que de la dérive totale de fréquence des deux impulsions pompe et sonde. Dans le cas où seule l'impulsion sonde présente une dérive de fréquence, l'impulsion pompe (ultracourte) définit alors le moment où commence l'interaction avec l'impulsion sonde.

6.2.3.1.2. Manipulation de ces transitoires cohérents par une impulsion mise en forme en amplitude et en phase

Participants : AM, JD, BC, BG, coll M. Motzkus

Publications : [J5], [J21]

Par analogie avec la diffraction de Fresnel, on peut réaliser l'équivalent de lentilles à zone de Fresnel, en découpant l'impulsion temporelle de manière à supprimer les zones produisant des interférences destructives. On peut même envisager de changer la phase du champ électrique de manière à convertir des interférences destructives en constructives.

Naturellement, compte tenu de nos échelles de temps, ceci n'est pas réalisable expérimentalement. Par contre en travaillant dans l'espace conjugué, on peut construire le spectre et la phase correspondante. La Figure 5.a représente le spectre théorique demandé en noir et le résultat expérimental en gris. La Figure 5.b montre le résultat sur les transitoires cohérents qui sont en parfait accord avec nos simulations.

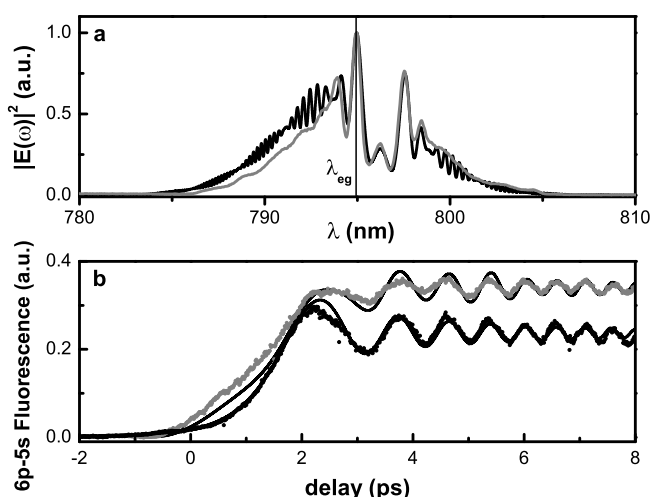


Figure 5 : En haut : spectre théorique et expérimental correspond à la suppression de la première contribution destructive ; En bas, les résultats expérimentaux correspondant.

La réalisation expérimentale a nécessité d'ajouter en plus d'un étireur qui permet d'introduire la dérive de fréquence suffisante pour l'observation des transitoires, un dispositif de mise en forme d'impulsions constitué d'une double barrette de cristaux liquides pixellisés (128 pixels) placée dans le plan de Fourier d'une ligne à dispersion nulle. Un tel dispositif permet une manipulation du champ en amplitude et en phase. La collaboration avec Marcus Motzkus du MPQ (Garching), nous a permis de disposer d'un tel système. En effet, en utilisant ce dispositif apporté de Garching, nous avons pu non seulement observer l'effet recherché mais aussi démontrer les limites de résolution du système. Nous avons aussi mis en évidence la possibilité de contrôler la phase des transitoires. En appliquant un simple saut de phase de π après la résonance, nous pouvons les placer en opposition de phase. Ces expériences de saut de phase de π nous ont permis au mois de mars 2003 de tester notre nouveau dispositif de mise en forme d'impulsions (cf partie « Instrumentation » plus haut) et de vérifier en même temps l'extrême sensibilité du système à tout changement de la phase du champ.

6.2.3.1.3. Application à la mesure de la fonction d'onde et de la phase et de l'amplitude du champ laser

Participants : AM, BC, BG

Publications : [J22], [J28]

Récemment nous avons développé un nouveau schéma de contrôle permettant d'avoir une information durant toute l'interaction. Pour ce faire on utilise une première impulsion qui transfère de la population dans l'état excité avant de faire interagir le système avec une impulsion à dérive de fréquence.

Les CT apparaissent alors sous forme d'oscillations présentes avant et après la résonance reflétant exactement la spirale de Cornu. Avec cette technique nous avons pu démontrer qu'on peut regarder l'évolution de la fonction d'onde durant l'interaction avec le champ en temps réel, comme le montre la Figure 6. De plus en dérivant cette spirale on peut montrer qu'on peut reconstruire la phase et l'amplitude du champ électrique. Enfin des simulations récentes montrent que par cette méthode la reconstruction d'impulsions extrêmement complexes est possible. *Ces résultats convaincants devraient être étendus par la suite à la mesure de la phase d'impulsions UV.*

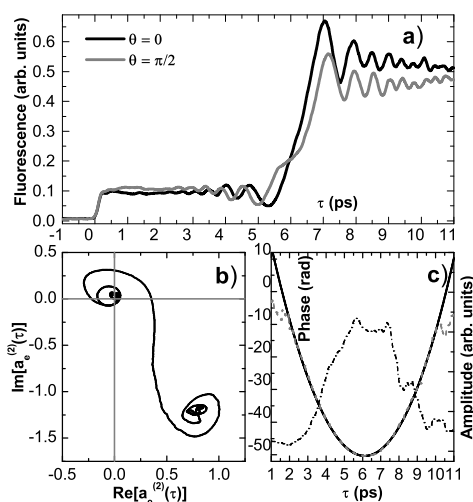


Figure 6 :

a: Transitoires cohérents bruts; Entre les deux courbes, une phase additionnelle de $\pi/2$ est ajoutée à la seconde impulsion.

b: Amplitude de probabilité (spirale de Cornu) reconstruite et présentée dans le champ complexe;

c: Amplitude et phase temporelles reconstruites du champ électrique de l'impulsion laser.

6.2.3.2. Interférences quantiques dans les transitions multiphotoniques excitées par des impulsions à dérives de fréquence

6.2.3.2.1. Excitation à deux photons du sodium - Applications à l'étoile laser artificielle

Participants : Exp : SS, JD, BC, BG, coll. JP Pique, Theo : BC, AM, BG, coll C. Meier, A. Dupays

Publications : [J12], [J19]

Dans les transitions multi-photoniques, l'état final peut être fortement affecté par la forme de l'impulsion. Nous avons montré comment apparaissent des interférences quantiques entre excitation séquentielle et excitation à deux photons directe (cf rapport d'activités 1999-2002). A la différence des expériences précédentes effectuées sur une transition à un photon où l'état final est indépendant de la phase du champ, ici nous avons étudié l'effet d'une dérive de fréquence sur une transition à deux-photons dans une échelle de niveaux quasi harmonique dans l'atome de sodium. Parallèlement à l'expérience nous avons pu mettre en évidence une expression analytique de ces deux chemins séquentiel et direct qui permet d'avoir accès non seulement à la période des oscillations mais aussi à leur phase absolue. D'autre part, cette étude a montré des décalages importants dus aux ordres supérieurs de la dispersion

(essentiellement du ϕ''') de la position du passage par la dérive de fréquence nulle suivant l'état final (4d ou 5s).

Enfin ce travail permet de définir un schéma optimal de transfert de population applicable aux expériences de l'étoile artificielle polychromatique initié par Foy et al⁶³.

Une prolongation de ce travail est en cours avec un travail théorique mené en collaboration avec C. Meier et A. Dupays, sur la comparaison entre l'optimisation d'une transition à deux-photons en boucle ouverte et l'utilisation d'un algorithme génétique.

6.2.3.2.2. Factorisation de nombres premiers par impulsions à dérive de fréquence

Participants : **BG**, coll. W. Schleich, W. Merkel (Ulm)

Publication : [J29]

Dans le schéma d'excitation d'une échelle de niveaux par une impulsion à dérive de fréquence, il apparaît des interférences entre excitation « à deux photons directe » ou « en échelons ». Lorsque plusieurs états intermédiaires sont présents, des interférences apparaissent entre les différents chemins séquentiels associés. La phase d'interférence dépend quadratiquement de l'écart à résonance. Ainsi, pour une série de N niveaux équidistants, les termes d'interférences contiennent des sommes de Wigner. La phase d'interférence présente, en fonction du paramètre de chirp, des maxima secondaires pour des valeurs correspondant à des diviseurs de N . Même si cette connexion était assez inattendue et surprenante, ce protocole nous semble pour l'instant assez anecdotique car il n'a été démontré pour l'instant d'un point de vue théorique que pour des nombres inférieurs à 100. Le nombre élevé de niveaux nécessaires pour obtenir un bon contraste reste un obstacle pour appliquer cette approche à de grands nombres.

6.2.3.3. Propriétés de paquets d'onde d'électrons créés par une impulsion chirpée.

Participants= **MAB**, **JCD**

Publications : [J2] [J11]

Nous avons étudié les propriétés dynamiques des paquets d'ondes d'électrons créés dans le continuum. Nous avons montré théoriquement comment une impulsion à dérive de fréquence peut compenser la dispersion du vide. Un paquet d'ondes d'électrons libres créé à partir d'un atome peut alors être focalisé radialement sur des distances macroscopiques. Nous avons alors étendu l'étude au cas de champ fort et montré que ce cas restait favorable à une telle focalisation. Un nouveau phénomène apparaissait alors, le rétrécissement par saturation de la distribution énergétique des électrons dans le continuum.

6.2.4. Etudes des effets de propagation d'impulsions ultracourtes.

Les études des phénomènes à l'échelle atomique ou moléculaire concernent souvent des atomes ou molécules pris individuellement. Le passage à un nombre élevé de particules met en jeu la réponse collective. Maîtriser l'influence des effets de propagation qui surgissent devient cruciale pour connaître le devenir de ces phénomènes. D'autre part, les réponses transitoires qui résultent de ces excitations en régime de forte épaisseur optique peuvent modifier notablement la forme temporelle des impulsions qui se propagent. Utiliser la forte dispersion qui existe autour d'une résonance atomique pour modifier de façon contrôlée une impulsion lumineuse est une alternative viable aux méthodes de mise en forme classique utilisant un dispositif type « pulse shaper ». Elle présente notamment l'avantage de pouvoir fonctionner dans des domaines de longueur d'ondes inaccessibles aux dispositifs « pulse shaper » (UV), toutefois avec un nombre réduit de degrés de liberté. Les études que nous avons mises en place répondent à un double objectif : contrôler les effets de distorsion due à

⁶³ R. Foy, A. Migus, F. Biraben, G. Grynberg, P. R. McCullough et M. Tallon, *Astron. & Astroph. Suppl. Series* 111, 569 (1995).

la propagation et utilisation de la dispersion résonante pour la mise en forme temporelle d'impulsions ultra-courtes.

6.2.4.1. Contrôle de la dispersion résonante

6.2.4.1.1. Cas d'un train d'impulsions cohérentes

Participants= MAB, MJ, SB

Publication : [J8]

Une première série d'expériences concerne des schémas d'excitations où l'objectif est d'éliminer les effets de dispersion. Nous avons étudié l'influence de la dispersion sur un train d'impulsions femtosecondes. Nous avons montré que cette séquence pouvait se propager de manière robuste ou en étant extrêmement déformée selon que la phase relative entre deux impulsions consécutives était soit égale à 0 ou π . Ce phénomène s'explique par le fait que le spectre de la séquence excitatrice présente ou pas des composantes spectrales dans le domaine où la dispersion affecte de manière importante la phase spectrale du champ.

6.2.4.1.2. Compensation directe de la dispersion pour une impulsion femtoseconde

Participants= MAB, BC, BG, JCD, AM, PZ, AA.

Publication : [J26]

La deuxième expérience, consistait à faire propager une impulsion femtoseconde en ayant pré-compensé la dispersion introduite par le milieu atomique grâce à un dispositif de mise en forme de haute résolution type « pulse shaper ». Le résultat est spectaculaire : l'impulsion sort du milieu atomique pratiquement sans déformation. Nous avons aussi étudié les limitations d'une telle technique qui sont essentiellement dues à la résolution finie du pulse-shaper qui ne permet pas de compenser la partie divergente au voisinage de la résonance. Cet effet ne concerne toutefois qu'une fraction faible de l'énergie de l'impulsion.

6.2.4.2. Mise en forme temporelle en utilisant la dispersion résonante dans une vapeur atomique

Une deuxième série d'études réalisées a consisté à modifier les propriétés temporelles et/ou spectrales d'une impulsion dans un régime où, soit la fréquence laser est variable et la fréquence atomique fixe soit l'inverse. Le premier cas correspond au cas d'une impulsion à dérive de fréquence se propageant dans le milieu atomique résonant ou quasi-résonant tandis que le second cas correspond à la situation où une impulsion intense modifie par déplacement lumineux les propriétés dynamiques d'un système atomique.

6.2.4.2.1. Déformation temporelle d'une impulsion à dérive de fréquence

Participants= MAB, VB, JCD

Publications : [J15]

Nous avons propagé une impulsion de faible intensité à dérive de fréquence dans un milieu résonnant. Nous avons effectué une étude complète du phénomène aussi bien d'un point de vue expérimental que théorique. Deux types d'interférences interviennent dans le processus : d'une part l'interférence entre le champ rayonné à résonance et le champ rayonné hors résonance; d'autre part l'interférence entre le champ incident et le champ rayonné. La déformation du champ transmis par le milieu atomique se traduit par une forte modulation temporelle résultant uniquement de l'interférence entre la partie résonante du champ rayonné et le champ incident.

6.2.4.2.2. Mise en forme temporelle d'une impulsion par déplacement lumineux dans un système à trois niveaux.

Participants= MAB, JCD

Publication : [J17]

Une impulsion faible ultracourte se propageant dans une vapeur atomique présentant une résonance ($|a\rangle \rightarrow |b\rangle$), subit une déformation en temps sur une échelle plus grande que sa durée. Quand un champ fort est appliqué de façon non résonante sur la transition $|b\rangle \rightarrow |c\rangle$, un important déplacement lumineux se produit. Nous avons étudié théoriquement le comportement de l'impulsion qui se propage et celui du système dans de telles conditions. Pour le profil transmis du champ, des changements importants se produisent : aux temps longs, on obtient une réduction significative de la queue de l'impulsion alors que des oscillations apparaissent aux temps courts, signature des effets de déplacements lumineux. Ces effets de mise en forme sont accompagnés par l'apparition de nouvelles fréquences dans le spectre pour l'impulsion faible. Ils peuvent être interprétés comme le résultat de l'interférence entre le champ incident de fréquence fixe et le champ rayonné de fréquence variable au cours du temps à cause du caractère transitoire du déplacement lumineux.

6.2.4.2.3. Observation de transitions non-adiabatiques dans un système à deux niveaux soumis à un champ fort

Participants= MAB, JCD, AFH

Nous avons étudié l'interaction d'un système à deux niveaux avec un champ bichromatique se composant d'une impulsion intense non-résonante et d'une impulsion résonnante faible. Le milieu est optiquement épais et nous sommes intéressés à la modification du spectre et de la forme temporelle de l'impulsion faible transmise.

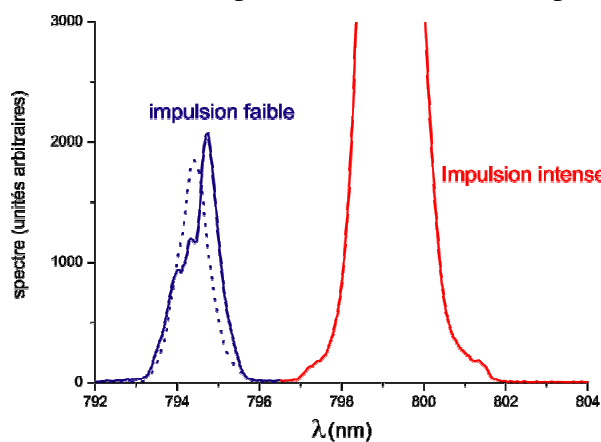


Figure 7 : Spectre des impulsions intense (rouge) et faible (bleue). La résonance atomique du rubidium est à 794.76 nm. L'impulsion faible en entrée du milieu (pointillé) va voir son spectre modifié en sortie (trait plein) par les transitions non-adiabatiques dues au champ fort. Celles-ci sont responsables du transfert de population entre les deux états et de l'émission de composantes spectrales autour de la fréquence de résonance.

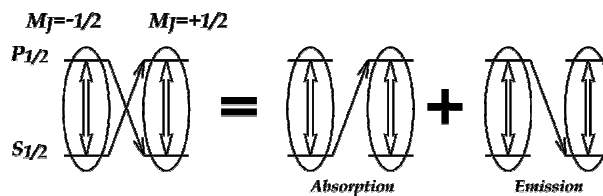
Contrairement au cas précédent, l'interaction du système avec le champ fort ne se résume pas uniquement à un déplacement lumineux. Quand les deux impulsions se propagent dans la même direction, nous avons montré expérimentalement que le spectre de l'impulsion faible pouvait être modifié de façon importante par les transitions non-adiabatiques induites par le champ fort (Figure 7). Dans le cas où les directions de propagation des deux impulsions font un angle entre eux, nous avons montré théoriquement que l'impulsion faible subissait uniquement le même type de mise en forme temporelle que dans le cas du système à trois niveaux et décrit plus haut.

6.2.4.2.4. *Contrôle cohérent de l'énergie et la forme temporelle d'une impulsion se propageant dans un système à quatre niveaux soumis à un champ fort.*

Participants= MAB, JCD

Une séquence de deux impulsions femtosecondes dont les polarisations sont croisées, l'une intense et l'autre faible excitent la transition $S_{1/2} \rightarrow P_{1/2}$ du rubidium. Le système est alors équivalent à un système à quatre niveaux où le champ fort crée deux superpositions d'états que le champ faible couple entre eux. Les amplitudes de transitions font alors apparaître une interférence entre deux chemins quantiques, l'un dû à l'absorption et l'autre dû à l'émission. Par analogie, les franges de Ramsey temporelles classiques ne font intervenir que deux chemins d'absorption.

a)



b)

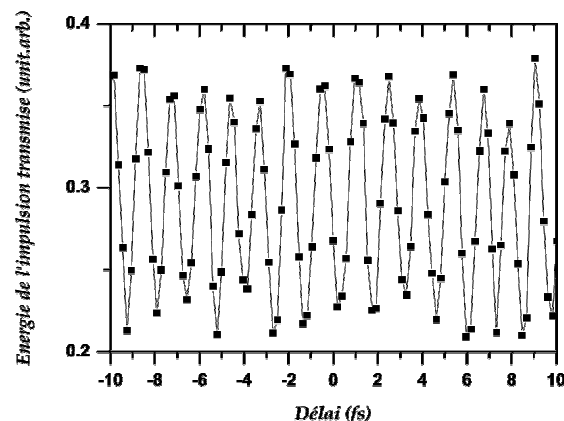


Figure 8 (a) Schéma d'excitation du rubidium en polarisations croisées. L'impulsion forte relie des états de mêmes moments magnétiques tandis que l'impulsion faible relie des états de moments magnétiques différents. On voit alors apparaître les deux chemins quantiques reliés à l'absorption et à l'émission. (b) Energie de l'impulsion faible en sortie du four en fonction du délai entre impulsions. En variant le délai, on varie la phase relative. La période d'interférence est de 1.35 fs moitié de la période optique

La phase d'interférence fait intervenir le double de la fréquence de transition, ce qui a été observé sur l'énergie transmise de l'impulsion faible. Cet effet se traduit aussi par une dépendance de la forme temporelle de l'impulsion faible qui passe d'un régime de transparence (c'est à dire non déformée) pour une valeur de la phase telle qu'il y a interférence destructive entre les chemins de transition à un régime de forte modification temporelle quand l'interférence est constructive et que l'amplification peut être importante (cf Figure 8).

6.2.5. Dynamique de polarisation et de spin dans GaAs/AlGaAs.

Participants = VB en collaboration avec J. A. Davis, J. J. Wathen et R. T. Phillips

Publication = [J25]

Les deux expériences présentées ici ont été réalisées pendant l'année passée dans le groupe d'optoélectronique du Cavendish laboratory à Cambridge.

Nous avons dans un premier temps développé une expérience de mélange à quatre ondes dégénérées (FWM), résolue en temps et sensible à des variations de la polarisation émise sur plus de 6 décades, soit 12 décades sur l'intensité de polarisation. Le signal de FWM permet de sonder directement les dynamiques de cohérences d'un ensemble d'excitons. Le premier faisceau laser \vec{k}_1 crée une polarisation cohérente dans l'échantillon par transition résonante et le second faisceau \vec{k}_2 sonde cette cohérence. Si la durée de vie de la cohérence est plus longue que le décalage temporel ΔT_{12} entre \vec{k}_1 et \vec{k}_2 , un signal de FWM est émis dans la direction $(2\vec{k}_2 - \vec{k}_1)$ correspondant à la diffraction d'un second photon de k_2 par le réseau d'interférence entre la polarisation induite par k_1 et le faisceau k_2 . Ce processus est donc sensible à la polarisation au 3ème ordre. De plus sa résolution temporelle permet de différencier les processus d'écho de photon (PE) des relaxations de polarisations libres (Free Polarisation Decay) et ainsi d'assigner proprement la valeur du temps de déphasage T_2 , mais aussi les battements quantiques des interférences de polarisation.⁶⁴ Le champ FWM est résolu temporellement par interférométrie optique avec une impulsion de référence en scannant le retard entre cette impulsion et le signal de FWM. Cette sensibilité de 6 décades, deux fois plus importante que les techniques standards utilisées, est possible en hétérodynant le signal interférométrique, en utilisant des photodiodes équilibrées pour sa détection et finalement en collectant ce signal par un analyseur de spectre insensible aux variations inhérentes à l'interféromètre.

L'hétérodynage est obtenu en décalant la fréquence de l'impulsion k_1 par Ω_1 (acousto optique à ~ 38 MHz) et celle de l'impulsion de référence par Ω_R (~ 40 MHz), de telle sorte que le signal d'interférence apparaît à la fréquence $(\Omega_1 - \Omega_R)$.

Cette grande sensibilité nous a permis de revisiter l'origine des battements observés sur le signal FWM dans un puits quantique dont l'épaisseur varie d'une monocouche.⁶⁵ Malgré tous les progrès réalisés ces dernières années, les interfaces des hétérostructures ne sont en effet pas parfaitement planes, mais se présentent plutôt sous forme d'îlots 2D variant par une monocouche avec des étalements latéraux variant de 1 à 10 000 nm. Les puits quantiques étudiés à 5K sont des puits de GaAs de 56 à 200 Å d'épaisseur dans du AlGaAs. Ces défauts d'interfaces correspondent typiquement à 5% de l'épaisseur dans des puits de 56 Å. Ainsi en plus du potentiel de confinement le long de l'axe de croissance, ces fluctuations de monocouche induisent un confinement dans le plan même du puits qui décale les transitions excitoniques de plusieurs meV. Puisque capables de confiner en 3D, ces îlots sont parfois aussi nommés "boite quantique d'interface". Afin de comprendre la nature des états impliqués et l'importance du confinement quantique sur les cohérences, le signal FWM est résolu temporellement en faisant varier de 0-11T un champ magnétique en configuration de Faraday. Ce champ confine les excitons dans le plan du puit et limite ainsi les différentes

⁶⁴ Koch, M., et al., *Quantum Beats Versus Polarization Interference - an Experimental Distinction*. Phys. Rev. Lett., 1992. 69, 3631.

⁶⁵ Koch, M., et al., Coupling of Exciton-Transitions Associated with Different Quantum-Well Islands. Phys. Rev. B, 1993. 48, 11480. Zhu, X.J. et al., Quantum Beats in Photon-Echo from 4-Wave-Mixing. Phys. Rev. Lett., 1994. 73, 209. Euteneuer, A., et al., Coherent excitation spectroscopy on inhomogeneous exciton ensembles. Phys. Rev. Lett., 1999. 83, 2073.

diffusions à l'origine des déphasages. Ainsi de précieuses informations sur les effets de localisation aux interfaces peuvent être extraites.

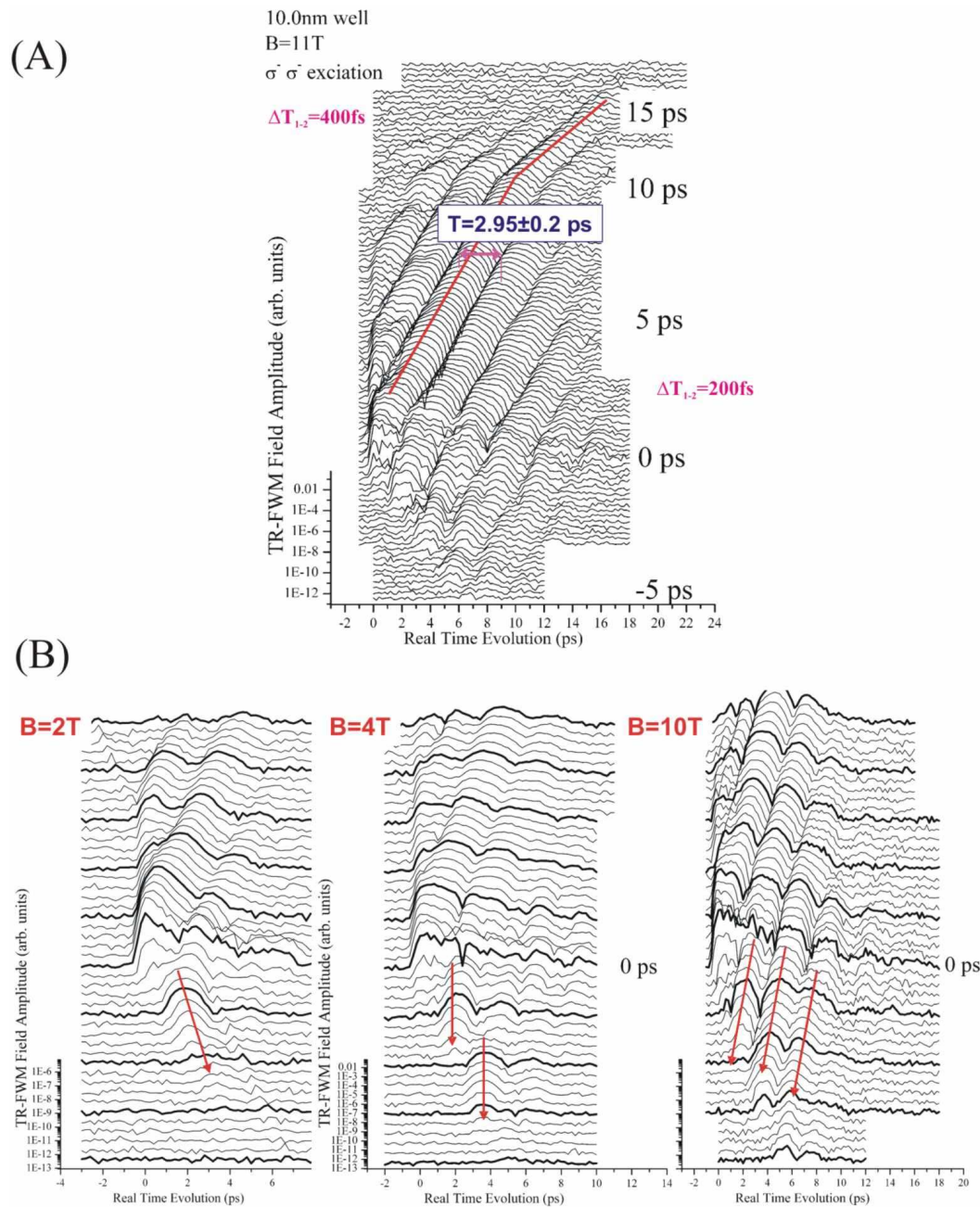


Figure 9 : (A) Signal de FWM d'un puit de 10 nm enregistré pour un champ de 11T. L'axe des abscisses correspond au délai entre l'impulsion de référence et le signal de FWM et chaque profil temporel de FWM à un décalage ΔT_{12} différent. (B) Variation en fonction du champ magnétique du profil temporel du signal FWM collecté en $\Delta T_{12} < 0ps$.

Les excitons créés sont seulement de type trous lourds. Le signal FWM est de type PE avec T_2 croissant avec la réduction de l'épaisseur. La présence de PE révèle la nature fortement inhomogène de l'élargissement des bandes de transition, tandis que d'importants T_2 , un très fort confinement limitant la relaxation par collision ou capture pour chaque exciton. Toutefois dès que l'épaisseur dépasse 100Å, le signal est de type FPD aux temps courts, puis devient aux temps longs en PE. (Figure 9-A) Plus le champ magnétique est élevé, plus la FPD domine. Cette transition de FPD vers PE implique la présence de deux types

d'excitons relaxant de manière différente et sur des temps différents : les excitons localisés sur des îlots de rayon supérieur au rayon de Bohr sont élargis de manière homogène tandis que ceux plus petits le sont de manière inhomogène.⁶⁶

En augmentant le champ magnétique, le confinement quantique devient plus important telle que la fonction d'onde de l'exciton ne dépasse pas la dimension de l'îlot : ainsi les transitions deviennent plus homogènes et la FPD domine. La seconde principale information sur la nature des états est donnée par les modulations sur le profil temporel de FWM. Elles sont la signature d'interférences de polarisation : soit le système est défini par deux transitions d'énergie différente sans interaction émettant chacune une polarisation qui ensuite interfèrent optiquement. Les différences d'énergie déduites des périodes d'oscillation observées sont également en très bon accord avec les spectres d'excitation enregistrés en photoluminescence. Puisque cette différence d'énergie ne varie pas en fonction du champ magnétique, le confinement quantique dans le plan du puits est le même pour ces deux types d'îlots. Toutefois cette même période d'oscillation apparaît aussi sur la hauteur des maxima du signal de FWM, signe que certains excitons contenus dans des îlots différents sont couplés pour produire des battements quantiques. Ce surprenant résultat est encore plus évident aux temps négatifs, pour lesquels les équations classiques de Bloch ne prédisent aucun signal. Ce signal à $\Delta T_{12} < 0$ ps est en fait généré, pour des échantillons fortement homogènes, par la polarisation induite : k_2 génère une polarisation, k_1 le réseau d'interférence et la polarisation induite par k_2 est alors diffractée dans la direction $2k_2 - k_1$. Or ce signal, quasi absent pour les puits de faible épaisseur car trop inhomogènes, devient de plus en plus important en fonction du champ magnétique pour les puits de taille supérieure à 100Å avec un caractère variant fortement en fonction du champ. (Figure 9-B) Pour comprendre cette dépendance nous avons développé deux modèles incluant les effets de champ local : un à trois niveaux avec une cohérence passant par l'état fondamental et un à deux systèmes à deux niveaux sans interaction. A faible champ, la dépendance de FWM est bien modélisée par un système à trois niveaux, laissant supposer que les excitons de différents îlots sont en interaction via des couplages dipôle-dipôle. Par contre le confinement généré à fort champ restreint le recouvrement entre les fonctions d'onde des excitons et le modèle le plus adéquat est celui de systèmes à deux niveaux sans interaction. La nature des battements dépend clairement de l'importance du potentiel de confinement. La difficulté d'une telle expérience a été d'augmenter la sensibilité pour travailler à des densités excitoniques les plus faibles possibles tout en étant capable de résoudre temporellement le signal de FWM. C'est notamment cette très grande sensibilité qui a permis de prospecter les signaux aux temps négatifs.

La seconde expérience est une expérience pompe-sonde classique en champ magnétique (configuration Faraday) sur des multicouches de boîtes quantiques de GaAs/AlGaAs. Le signal est la modulation de l'intensité de l'impulsion sonde réfléchiée par l'échantillon en polarisation parallèle ou croisée. Le champ magnétique lève la dégénérescence de spin par effet Zeeman. Les états purs de spin peuvent alors être excités de manière cohérente par l'impulsion pompe. Des battements quantiques entre les deux niveaux sont alors observés. A partir de leur période et de leur amortissement, le facteur g de Landé et la durée de vie de la cohérence de spin de l'exciton sont précisément déterminés. Cette durée de vie décroît avec l'augmentation du champ magnétique, contrairement aux prévisions. Ceci peut s'expliquer en terme d'inhomogénéité dans les facteurs de Landé. Une autre interprétation est l'augmentation de la densité de phonons acoustiques avec un champ magnétique croissant⁶⁷ qui par diffusion déphase le spin des excitons. Des expériences réalisées à différentes températures montrent qu'en fait les deux mécanismes coexistent.

⁶⁶ Birkedal, D., et al., *Nanoroughness Localization of Excitons in Gaas Multiple-Quantum Wells Studied by Transient 4-Wave-Mixing*. Phys. Rev. B, 1995. 51, 7977.

⁶⁷ Tsitsishvili, E., et al, Phys. Rev. B 67, 205330 (2003)

6.3. Applications aux interfaces thématiques

6.3.1. Ablation laser à des fins d'analyses géochimiques

Participants : BC, AA, coll F.Poitrasson, B. Dupré (LMTG)

publication : [J29]

Béatrice Chatel a commencé une collaboration avec le LMTG (Laboratoire de Géochimie, UMR 5563, "Mécanismes de Transfert en Géologie", Toulouse) afin d'optimiser un dispositif d'analyse de solides par ablation laser. Ce laboratoire s'est équipé d'une chaîne laser délivrant des impulsions femtosecondes de 25mJ - 10Hz - 50fs à 800 nm couplée à un microscope. Ce dispositif est associé à l'appareil d'analyse élémentaire et isotopique dit LA-ICP-MS. Ainsi obtiennent-ils une résolution spatiale et les qualités athermiques liées à l'ablation laser. Le but est d'optimiser les caractéristiques d'une impulsion laser femtoseconde pour l'analyse de solides par ablation dans le but de dater des phénomènes géologiques. Une étude détaillée de l'influence de la durée de l'impulsion sur la mesure de rapport isotopique ainsi qu'une étude comparative de l'analyse chimique en fonction de la longueur d'onde ont été effectuées. Des résultats préliminaires ont déjà été présentés. Ces travaux permettent une avancée dans les techniques employées de ce domaine. Ils confirment en particulier que la longueur d'onde ne joue aucun rôle au niveau de l'analyse chimique mais que par contre il est important de travailler avec une durée suffisamment courte pour obtenir une bonne justesse de mesure des rapports isotopiques par exemple. *Par la suite, l'utilisation d'impulsions façonnées est envisagée.*

Dans le cadre de ce projet, nous avons pu bénéficier d'un support financier du Fond Social Européen pour une bourse post-doctorale qui a permis à Arnaud Arbouet de venir travailler dans le groupe pendant un an. Nous sommes soutenus financièrement pour cette action par un BQR interdisciplinaire de l'université Paul Sabatier.

6.3.2. Détection de particule unique

En collaboration avec l'Institut de Pharmacologie et Biologie Structurale (UMR 5089)

Participants :BC, JC, coll L. Salomé (IPBS)

L'Institut de Pharmacologie et Biologie Structurale (UMR 5089) cherchant une expertise en optique pour développer une nouvelle technique de suivi de particules uniques, a fait appel au groupe femtoseconde. Cette collaboration est financée dans le cadre d'un BQR interdisciplinaire de l'université Paul Sabatier.

Les techniques actuelles reposent sur l'imagerie de nanoparticules ou molécules fluorescentes uniques fixées à la molécule étudiée. Les performances de ces techniques sont dictées par le choix du marqueur et de la caméra. Pour augmenter significativement la résolution temporelle nous avons monté une **détection de position de particule par déflexion laser**. Une première série d'expériences a été effectuée dans le cadre du stage de Julien Courteaud (ENS Cachan). La faisabilité du montage a été démontrée. Les chercheurs de l'IPBS sont actuellement en train de finaliser le montage pour le rendre opérationnel.

6.3.3. Projets

6.3.3.1. Développements instrumentaux

Rendus nécessaires par les projets de contrôle cohérent et de dynamique moléculaire indiqués plus bas, certains de ces développements devraient pouvoir donner lieu à une valorisation industrielle. Ces développements concernent :

- Amplification du visible pour augmenter l'énergie en particulier dans la gamme proche UltraViolet (UV), ces travaux seront d'autant plus d'actualité que nous allons disposer d'une nouvelle chaîne plus puissante à l'automne 2005.

- Adaptation du dispositif de mise en forme d'impulsions à d'autres gammes de longueur d'onde,
- Amélioration de la caractérisation des impulsions façonnées. Développement d'une nouvelle technique dite ZAP ZAD SPIDER.
- Travaux sur la dépendance du doublage de fréquence en fonction de la forme des impulsions. Ce travail sera effectué dans la continuité du stage de M-E Rouffet. Les résultats pourraient avoir des applications dans le domaine de l'imagerie multiphotonique. Les travaux seront effectués en collaboration avec F. Amblard (Institut Curie).
- Les performances de la nouvelle chaîne (50 fs-3 mJ, 1 kHz) permettront d'envisager le développement d'une source VUV avec des performances tout à fait suffisantes pour l'étude de dynamique moléculaire.

6.3.3.2. Etude et Contrôle des dynamiques moléculaires

Une première étape consiste à détecter et comprendre les relaxations rapides tels que les conversions internes et les photodissociations. Le second objectif est de les contrôler par une mise en forme de l'impulsion pompe et/ou par une impulsion laser femtoseconde non résonnante d'intensité intermédiaire ($\sim 10^{10-12}$ Wcm⁻², IR). Le but est (1) de comprendre le contrôle en régime de champ intermédiaire, (2) de créer des nouveaux chemins de réaction photochimiques, (3) de comparer les efficacités entre le régime perturbatif et non perturbatif.

La nature et la dynamique des états de transition déterminent bien souvent les réactions chimiques. Un des challenges est de détecter ces configurations très fugaces correspondant à des changements de densités électroniques, des brisures ou créations de réactions chimiques. Ceci est réalisé par des expériences pompe-sonde femtosecondes et si possible comparé aux calculs de dynamiques moléculaire réalisés C Meier et M.C. Heitz. Outre les travaux déjà en cours sur l'azulène et le TTF déjà mentionnés, les systèmes étudiés seront choisis soit en fonction de leur caractère fondamental tel que l'influence des couplages non-adiabatiques dans la photodissociation des halogénures tels que CH₃Br ou C₆H₄Br₂⁶⁸, soit pour une application particulière telle que les transferts de charge (pyrrolobenzène)⁶⁹ ou encore un intérêt atmosphérique (CHBr₃⁷⁰ ou encore CFCIBr₂⁷¹). Ces expériences feront appel à des développements d'impulsions dans l'UV et également dans le VUV pour sonder plus facilement les produits de dissociation. Pour chaque étude de dynamique aboutie, une attention particulière sera portée vers des éventuels schémas de contrôle.

Le contrôle de dynamiques moléculaires en utilisant des impulsions mises en forme a été démontré dans les cas perturbatifs (10^9 Wcm⁻²) et le cas de régime en champs très forts ($>10^{13}$ Wcm⁻²). Ces deux régimes peuvent être décrits relativement correctement d'un point de vue théorique. Dans le cas du régime perturbatif, nous essaierons en collaboration avec Pr. B. Whitaker de contrôler la photodissociation de NO₂ via un contrôle de la dynamique autour de l'intersection conique entre l'état fondamental et l'état B. Ceci impliquera l'utilisation d'impulsions mises en forme dans l'UV ou le visible (transition à deux-photons) et utilisées dans une approche de type contrôle optimal. Nous essaierons également de contrôler la dynamique de relaxation dans l'azulène au voisinage de la conversion interne S₀-S₁.

Le régime de champ intermédiaire ($\sim 10^{10-12}$ Wcm⁻²), correspondant à un régime non-perturbatif sans ionisation est en cours d'exploration avec quelques expériences très prometteuses.⁷² Comprendre ces résultats expérimentaux reste encore aujourd'hui un enjeu

⁶⁸ M. Kadi and J. Davidsson, Chem. Phys. Lett. 378, 172-177 (2003).

⁶⁹ L. Belau, Y. Haas and W. Rettig, Chem. Phys. Lett. 364, 157-163 (2002)

⁷⁰ P. Zou, J. Shu, T. J. Sears, et al., Journal of Physical Chemistry A 108, 1482 (2004).

⁷¹ N. L. Owens, et al., Chem. Phys. Lett. 370, 469-477 (2003).

⁷² R. J. Levis, G. M. Menkir and H. Rabitz, Science 292, 709-713 (2001).

pour les théoriciens. Afin de faciliter les comparaisons entre expériences et théorie, nous proposons dans ce projet de découper le contrôle par trois impulsions différenciées en énergie et temps : pompe-sonde traditionnel avec une impulsion intermédiaire de contrôle.

6.3.3.3. Contrôle de processus physiques

Les travaux sur la mesure de fonction d'onde utilisant les transitoires cohérents seront étendus dans les directions suivantes :

- Mesure en temps réel d'un paquet d'ondes (extension du schéma initial au cas de plusieurs états quantiques).
- Caractérisation d'impulsions fortement façonnées et/ou dans une gamme de longueur d'onde moins usuelle comme l'UV par exemple. Dans ce dernier cas, le rubidium serait remplacé par le mercure.

Le modèle des transitions à deux-photons sera utilisé pour tester en parallèle sur l'expérience et sur la théorie, des algorithmes d'optimisation type génétique en cherchant dans les deux cas à optimiser le signal de fluorescence. Ce travail est fait en collaboration avec Christoph Meier. De premières simulations présentent des résultats assez inattendus qui demandent à être validés.

Le développement du dispositif de façonnage haute résolution nous a permis d'acquérir une certaine expertise dans le domaine. Dans ce cadre deux collaborations qui utiliseraient ce dispositif sont en projet:

- La première se ferait avec l'équipe de Pierre Pillet (Laboratoire Aimé Cotton). Le but de notre projet est de réaliser le contrôle total de tous les degrés de liberté de la molécule en utilisant notamment le façonnage d'impulsions. Il devrait être alors possible de refroidir les molécules. Ce projet ambitieux comporte pas mal d'incertitudes techniques et théoriques. Les premières expériences devraient avoir lieu dans l'hiver 2005.

- La seconde est basée sur le concept de superrésolution temporelle et s'effectuera avec Philippe Balcou (Laboratoire d'Optique Appliquée). Il s'agit là de façonner des impulsions pour arriver à obtenir des impulsions plus courtes que la limite par transformée de Fourier. Ces impulsions sont accompagnées de petits satellites qui sont naturellement éliminés si ces impulsions servent à la génération de processus hautement non-linéaires comme la génération d'harmoniques d'ordre élevé.

- Les études entamées en collaboration avec K. Ohmori (IMS) se poursuivront. Des schémas basés sur des séquences d'impulsions à dérive de fréquence ont été proposés récemment par Nakamura (IMS) pour peupler sélectivement un niveau (parmi plusieurs) ou une superposition bien définie de plusieurs niveaux⁷³. Ces schémas, ainsi que plusieurs variantes, seront testés sur la molécule d'iode et/ou des atomes.

⁷³ K. Nagaya, Y. Teranishi, and H. Nakamura, Control of molecular processes by a sequence of linearly chirped pulses, *J. Chem. Phys.* **117**, 9588 (2002).

6.4. Les collaborations nationales et internationales

Dates	Programme/ financement	Correspondant LCAR	Correspondant étranger	Université/ Institut -ville	Pays	Thème	Publis
2002-3	Egide - Procopé	P. Labastie	L. Wöste	MBU-FU- Berlin	Allemagne	Etude et contrôle de la dynamique des halogénures d'alcalin	[J16]
2002-4	UPS	M.A. Bouchène	M. Ali	El Baath/Homs	Syrie	Optimisation d'impulsions	[JA1]
2003-4	PAI CNRS/NRC	B. Girard V. Blanchet	A. Stolow	Steacie Institut- Ottawa	Canada	Contrôle cohérent	
2003-4	-	V. Blanchet		Cavendish Laboratory Cambridge	UK	Dynamique de relaxation dans des boîtes et des puits quantiques	[J25]
2003-6	PPF	B. Girard	X. Marie D. Shepelyanski	UPS-INSA Toulouse	France	Contrôle cohérent et calcul quantique	
2000-4	COCOMO 5ème PCRDT	B. Girard		Réseau Marie Curie	Europe		
2004-8	XTRA 6ème PCRDT	B. Girard		Réseau Marie Curie	Europe		
2004-5	-	B. Girard	W. Schleich	Ulm	Allemagne	Control cohérent et calcul quantique	
2004-5	BQR	B. Chatel	L. Salomé	UPS Toulouse	France	Suivi de particule unique	
2004-5	-	B. Chatel	D. Kaplan	Fastlite Palaiseau	France	Façonnage d'impulsions visibles	[J23]
2004-5	BQR	B. Chatel	F. Poitrasson	UPS Toulouse	France	Ablation laser	[J29]
2005-	Prestation de service	B. Chatel	G. Riboulet	Amplitude Evry	France	Source UV accordable	
2005	-	V. Blanchet	A. Wodtke	UCSB-Santa- Barbara	USA	Imagerie de photodissociation	[J24]
2005-6	Egide - Sakura	B. Girard	K. Ohmori	IMS - Okasaki	Japon	Interférences quantiques	[J27]

6.5. Les soutiens financiers obtenus au cours des 4 années

Dates	Programme	Titre du projet	Montant (€)
2000-2006	CPER	Spectroscopies optiques ultimes	900 000 dont 450 000 pour Femto/LCAR
2000-2002	ACI Photonique	Femtochimie et photoelectrons	36 158
2000-2004	COCOMO	Coherence and control in atomic and molecular systems and processes	145 000 pour Femto/LCAR (95 000 en personnel)
2003-2006	PPF	Control cohérent et calcul quantique	14 400
2003-2004	PAI CNRS/NRC	Contrôle cohérent	30 000
2004-2005	BQR IPBS / LCAR	Analyse haute fréquence de la dynamique de biomolécules individuelles par « laser deflection particle tracking »	12 000
2004-2005	BQR LCAR / LMTG	Amélioration des caractéristiques d'une impulsion laser femtoseconde pour l'analyse de solides par ablation dans le but de dater des phénomènes géologiques.	15 000
2005	Amplitude	Développement d'une source UV accordable.	10 600
2005	Prix Del Duca	Académie des Sciences	100 000 (Equipment) 40 000 (post-docs)

6.6. Les publications

6.6.1. Journaux à Comité de lecture

[J1] **M. A. Bouchene**

Dynamique et interférences de paquets d'ondes dans les alcalins
Ann. Phys. (Paris) **27**, 1-58 (2002).

[J2] **J. C. Delagnes and M. A. Bouchene**

Compensation of electron wave packet spreading with linearly chirped pulses: theoretical analysis
J. Phys. B **35**, 1819-1830 (2002).

[J3] **C. Nicole, M. A. Bouchene and B. Girard**

Dynamics and Interference of fine-structure wave packets created by strong ultrashort pulses
J. Mod. Optics **49**, 183-200 (2002).

[J4] **M. A. Bouchene**

Phase Control of Dispersion Effects for an Ultrashort Pulse-train Propagating in a Resonant Medium
Phys. Rev. A **66**, 065801 (2002).

[J5] **J. Degert, W. Wohlleben, B. Chatel, M. Motzkus and B. Girard**

Realization of a Time-Domain Fresnel Lens with Coherent Control
Phys. Rev. Lett. **89**, 203003 (2002).

[J6] **M. Wollenhaupt, A. Assion, D. Liese, C. Sarpe-Tudoran, T. Baumert, S. Zamith, M. A. Bouchene, B. Girard, A. Flettner, U. Weichmann and G. Gerber**
Interferences of ultrashort free electron wave packets
Phys. Rev. Lett. **89**, 173001 (2002).

[J7] **M. Lezius, V. Blanchet, M. Y. Ivanov and A. Stolow**
Polyatomic molecules in strong laser fields: Nonadiabatic multielectron dynamics
J. Chem. Phys. **117**, 1575-1588 (2002).

[J8] **M. Jacquy, S. Bonhommeau and M. A. Bouchene**
Experimental demonstration of phase control of dispersion effect for an ultrashort pulse train propagating in a resonant medium
Opt. Lett. **28**, 1272-74 (2003).

[J9] **F. Megi, M. Belkacem, M. A. Bouchene, E. Suraud and G. Zwicknagel**
On the importance of damping phenomena in clusters irradiated by intense laser fields
J. Phys. B **36**, 273-282 (2003).

[J10] **J. Degert, C. Meier, B. Chatel and B. Girard**
Coherent control of matter-wave interference in molecular predissociation
Phys. Rev. A **67**, 041402R (2003).

[J11] **M. A. Bouchene**
Radial focalisation of electron wave packets using linearly chirped intense pulses
Phys. Rev. A **68**, 023401 (2003).

[J12] **B. Chatel, J. Degert, S. Stock and B. Girard**
Competition between sequential and direct paths in a two-photon transition
Phys. Rev. A **68**, 041402R (2003).

[J13] **V. Blanchet, S. Boyé, S. Zamith, A. Campos, B. Girard, J. Lievin and D. Gauyacq**
(3+1)-resonantly enhanced multiphoton ionization-photoelectron spectroscopy of the (3d-4s) supercomplex of acetylene: The geometry of the E state revisited through experiment and theory
J. Chem. Phys. **119**, 3751-3762 (2003).

[J14] **S. Zamith, V. Blanchet, B. Girard, J. Andersson, S. Sorensen, I. Hjelte, O. Björneholm, D. Gauyacq, J. Norin, J. Mauritson and A. L'huillier**
The predissociation of highly excited states in acetylene by time-resolved photoelectron spectroscopy
J. Chem. Phys. **119**, 3763-3773 (2003).

[J15] **J. C. Delagnes, V. Blanchet and M. A. Bouchene**
Role of the radiated field in the propagation of an ultra-short chirped pulse.
Opt. Commun. **227**, 125-131 (2003).

[J16] **J. M. L'Hermite, V. Blanchet, A. Le Padellec, B. Lamory and P. Labastie**
Relaxation of photoexcited Na₃F
Eur. Phys. J. D **28**, 361-366 (2004).

- [J17] **J. C. Delagnes and M. A. Bouchene**
Effect of a transient light shift on the propagation of an ultrashort pulse in a resonant atomic medium
Phys. Rev. A **69**, 063813 (2004)
- [J18] **N. V. Vitanov and B. Girard**
Adiabatic excitation of rotational ladder by chirped laser pulses
Phys. Rev. A **69**, 033409-13 (2004).
- [J19] **B. Chatel, J. Degert and B. Girard**
Role of quadratic and cubic spectral phases in ladder climbing with ultrashort pulses
Phys. Rev. A **70**, 053414 (2004).
- [J20] **A. Monmayrant and B. Chatel**
A new phase and amplitude high resolution pulse shaper
Rev. Sci. Instr. **75**, 2668-71 (2004).
- [J21] **W. Wohlleben, J. Degert, A. Monmayrant, B. Chatel, M. Motzkus and B. Girard**
Coherent transients as a highly sensitive probe for femtosecond pulse shaper
Appl. Phys. B **79**, 435 - 439 (2004).
- [J22] **A. Monmayrant, B. Chatel and B. Girard**
Femtosecond pulse shape reconstruction from coherent transient measurements
Opt. Lett. **30**, xxxxx (2005).
- [J23] **A. Monmayrant, A. Arbouet, B. Girard, B. Chatel, B. J. Whitaker, A. Barman and D. Kaplan**
Optimisation of NOPA output pulse shaping using an AOPDF with dispersion self-correction
Appl. Phys. B **81**, 177 - 180 (2005).
- [J24] **V. Blanchet, P. C. Samar and A. M. Wodtke**
Photodissociation of CH₃Br in the A band and clusters studied by velocity mapping of the Methyl photofragment.
J. Chem. Phys. en préparation (2005P).
- [J25] **J. A. Davis, J. J. Wathen, V. Blanchet and R. T. Phillips**
Time Resolved FWM beat spectroscopy of excitons in a single quantum well
Phys. Rev. B en préparation (2005P).
- [J26] **J. C. Delagnes, A. Monmayrant, P. Zahariev, B. Chatel, B. Girard and M. A. Bouchene**
Compensation of resonant dispersion in atomic medium using a pulse shaper
Appl. Phys. B submitted (2005S).
- [J27] **H. Katsuki, H. Chiba, B. Girard, C. Meier and K. Ohmori**
Observing picometric quantum interference structures at the half revival time
Phys. Rev. Lett. submitted (2005S).
- [J28] **A. Monmayrant, B. Chatel and B. Girard**
Atomic spirograph: measurement of the excited state wave function using coherent transients
Phys. Rev. Lett. submitted (2005S).

[J29] **A. Arbouet, B. Girard, B. Chatel, R. Freydier, F. Poitrasson, B. Dupré, F. Candaudap**
Effect of pulse duration on chemical analysis of glass with LA-ICP-MS
Applied Physics A-Materials Science & Processing Submitted (2005)

[J30] **W. Merkel, M. Bienert, O. Crasser, F. Haug, E. Lutz, H. Mack, M. Freyberger, W. P. Schleich, I. S. Averbukh, B. Girard, H. Maier and G. G. Paulus**
Chirped pulses, Gauss sums and the factorization of numbers
International Journal of Modern Physics B soumis (2005S).

6.6.2. Chapitres de livres

[B1] **S. Zamith, V. Blanchet, B. Girard, J. Norin, J. Mauritsson, A. L'Huillier, J. Andersson, S. Sorensen, I. Hjelte, O. Bjorneholm and D. Gauyacq**
Predissociation dynamics of acetylene Rydberg states
dans *Femtochemistry and Femtobiology: Ultrafast Dynamics in Molecular Science*, édité par A. Douhal and J. Santamaria (World Scientific, Singapore, 2002), pp. 43-53.

[B2] **M. Belkacem, M. A. Bouchene, P. G. Reinhard and E. Suraud**
Photodynamics of nanoclusters
dans *Encyclopedia of nanosciences*, édité (2003), [B10] p. 203.

[B3] **T. Amand, V. Blanchet, B. Girard and X. Marie**
Coherent control in atoms, molecules and solids
dans *Femtosecond laser pulses. Principles and Experiments*, édité par C. Rullière (Springer, 2004), pp. 333-394.

[B4] **B. Chatel and N. Forget**
Sources ultracourtes accordables : état de l'art
dans *Lasers et Technologies Femtosecondes*, édité par M. Sentis and O. Uteza (Publications de l'Université Saint-Etienne, Saint Etienne, 2005), pp ; 207-221.

[B5] **B. Chatel and B. Girard**
Coherent Control of Atomic Dynamics with Chirped and Shaped Pulses
dans *Femtosecond Laser Spectroscopy*, édité par P. Hannaford (Springer, 2005), pp. 267-304.

[B6] **B. Girard**
Le Contrôle cohérent
dans *Lasers et Technologies Femtosecondes*, édité par M. Sentis and O. Uteza (Publications de l'Université Saint-Etienne, Saint Etienne 2005), pp. 261-278.

6.6.3. Comptes-rendus de conférence publiés

[P1] **S. Zamith, V. Blanchet, B. Girard, J. Norin, J. Mauritsson, A. L'Huillier, J. Andersson, S. Sorensen, I. Hjelte, O. Bjorneholm and D. Gauyacq**
Predissociation dynamics of acetylene Rydberg states
Femtochemistry and Femtobiology: Ultrafast Dynamics in Molecular Science (2002), A. Douhal and J. Santamaria ed., pp. 43-53.

[P2] **S. Zamith, J. Degert, S. Stock, B. de Beauvoir, V. Blanchet, M. A. Bouchène and B. Girard**

Effect of coherent transients on a pump-probe time resolved signal

Femtochemistry and Femtobiology: Ultrafast Dynamics in Molecular Science (2002), A. Douhal and J. Santamaria ed., pp. 559-67.

[P3] **J. Degert, C. Meier, B. de Beauvoir, M. J. J. Vrakking and B. Girard**

Spectroscopie de photofragments résolue en temps. Manipulation d'interférences et codage d'information dans une molécule en cours de prédissociation

J. Phys. IV France (2002), Vol. 12, pp. 253-254.

[P4] **S. Zamith, J. Degert, S. Stock, B. de Beauvoir, V. Blanchet and B. Girard**

Observation de transitoires cohérents excités par une impulsion ultracourte à dérive de fréquence

J. Phys. IV France (2002), Vol. 12, pp. 251-52.

[P5] **V. Blanchet, J. M. L'Hermite, A. Le Padellec, B. Lamory and P. Labastie**

Relaxation of photoexcited Na₃F.

Femtochemistry and Femtobiology: Ultrafast Dynamics in Molecular Science (2004), M. M. Martin and J. T. Hynes ed., pp. 57-61.

[P6] **B. Chatel, J. Degert, S. Stock and B. Girard**

Observation and manipulation of quantum interferences in ladder climbing

Ultrafast Phenomena XIV (Niigata, 2004), T. Kobayashi ed., pp. 861-863.

[P7] **D. Kaplan, P. Tournois, B. Chatel and A. Monmayrant**

Tunable wavelength pulse shaping of visible NOPA outputs with an Acousto-Optic Programmable Dispersive Filter

Ultrafast Phenomena XIV (Niigata, 2004), T. Kobayashi ed., pp. 70-72.

[P8] **A. Monmayrant, B. Chatel and B. Girard**

Towards electric field reconstruction using coherent transients in a two-level system

Ultrafast Phenomena XIV (Niigata, 2004), T. Kobayashi ed., pp. 91-93.

[P9] **M. A. Bouchene, J. C. Delagnes, M. Jacquy, S. Bonhommeau, P. Zahariev, A. Monmayrant, B. Chatel and B. Girard**

Propagation of ultrashort pulses in resonant atomic systems: Observation and control

J. Phys. IV France (2004), A. Aspect, J. Vigué, and B. Girard ed., Vol. 119, pp. 13-18.

[P10] **B. Chatel, J. Degert, S. Stock and B. Girard**

Interférences entre chemins quantiques dans une transition en échelons

J. Phys. IV France (2004), A. Aspect, J. Vigué, and B. Girard ed., Vol. 119, pp. 151-152.

[P11] **J. M. L'Hermite, V. Blanchet, A. Le Padellec, B. Lamory and P. Labastie**

Relaxation de Na₃F photoexcité

J. Phys. IV France (2004), A. Aspect, J. Vigué, and B. Girard ed., Vol. 119, pp. 211.

[P12] **A. Monmayrant, B. Chatel, J. Degert and B. Girard**

Manipulation de transitoires cohérents avec des impulsions mises en forme

J. Phys. IV France (2004), A. Aspect, J. Vigué, and B. Girard ed., Vol. 119, pp. 239-240.

[P13] **B. Chatel, A. Monmayrant and B. Girard**

The atomic spirograph: atomic wave function and laser pulse shape measurements from coherent transients

ICOLS05 (Aviemore, 2005).

6.6.4. Conférences invitées et communications orales

[I1] **V. Blanchet**

Discerning vibronic molecular dynamics using time-resolved photoelectron spectroscopy
INP, Japon (2002)

[I2] **V. Blanchet**

Dynamiques ultrarapides étudiées par spectroscopie de photoelectron résolue en temps
PAMO/JSM (Bourges), (2002)

[I3] **V. Blanchet*, B. Girard, et al**

Dynamique femtoseconde dans les Molécules et agrégats par excitation VUV
Journée Harmoniques VUV (Orsay, mars 2002), (2002).

[I4] **J. Degert, S. Stock*, B. Girard, B. Chatel**

Interferences in Quantum Ladder Climbing and Laser Guided Artificial Star
Ecole d'été sur le contrôle cohérent (Cargese), (2002).

[I5] **J. Degert*, S. Stock, B. Girard, B. Chatel, W. Wohlleben, M. Motzkus**

Manipulation of Coherent Transients with shaped ultrashort pulses
COCOMO network meeting (Sofia (Bulgarie), 5-6 apr 2002), N. Vitanov ed., (2002).

[I6] **B. Girard*, B. Chatel, J. Degert, C. Meier**

Coherent Control in Atoms and Molecules : Application to information storage ?
Quantware (Toulouse, Juillet 2002), D. Shepelyansky ed., (2002).

[I7] **B. Girard*, S. Zamith, J. Degert, S. Stock, V. Blanchet, B. Chatel, M. A. Bouchene**

Coherent Control in Atomic and Molecular Systems
Atomes, Molécules et Lumière – Colloque en l'honneur de Raymond Vetter (Gif sur Yvette, 12-13 nov 2002), C. Jungen ed., (2002).

[I8] **M. A. Bouchene**

Propagation d'impulsions femtosecondes dans un milieu optiquement dense : observation et contrôle
Coloq 8 (Toulouse, Septembre 2003), J. Vigué ed., (2003).

[I9] **B. Chatel*, J. Degert, A. Monmayrant, J. C. Delagnes, S. Stock, P. Zahariev, B. Girard, M. A. Bouchene**

Mise en forme et boucle ouverte: un mariage heureux
6^{èmes} Journées de Phénomènes Ultrarapides (Strasbourg, 3-5 septembre), P. Gilliot ed., (2003).

- [I10] **B. Chatel***, **J. Degert**, **A. Monmayrant**, **J.-C. Delagnes**, **S. Stock**, **P. Zahariev**, **B. Girard**, **M. A. Bouchene**
Coherent Control in Atoms with ultrashort chirped and shaped laser pulses
COCOMO network meeting (Heraklion (Crète), 9-10 oct 2003), D. Charalambidis ed., (2003).
- [I11] **B. Girard***, **B. Chatel**, **A. Monmayrant**, **M. A. Bouchene**, **J.-C. Delagnes**
Coherent Control in Atoms with ultrashort chirped and shaped laser pulses
Quebec International Symposium on Ultrafast Laser Science 2: interaction and propagation (Quebec City, 27-29 sept 2003), P. Agostini ed., (2003).
- [I12] **B. Girard***, **B. Chatel**, **A. Monmayrant**, **M. A. Bouchene**, **J.-C. Delagnes**
Coherent Control in Atoms with ultrashort chirped and shaped laser pulses
Optimal control of Quantum dynamics: Theory and experiment (Ringberg Castle (Allemagne), 7-10 dec 2003), M. Motzkus ed., (2003).
- [I13] **B. Girard***, **J. Degert**, **S. Stock**, **B. Chatel**, **W. Wohlleben**, **M. Motzkus**
Coherent Control in Atoms and Molecules with ultrashort chirped and shaped laser pulses
FRISNO 7 (Les Houches, 17-20 feb 2003), I. Abram ed., (2003).
- [I14] **B. Girard***, **J. Degert**, **S. Zamith**, **S. Stock**, **B. Chatel**, **M. A. Bouchene**, **V. Blanchet**, **W. Wohlleben**, **M. Motzkus**
Coherent Control in Atoms and Molecules with ultrashort chirped and shaped laser pulses
Analysis and control of ultrafast photoinduced reactions (Berlin, 20-22 march 2003), L. Wöste ed., (2003).
- [I15] **B. Girard***, **J. Degert**, **S. Zamith**, **S. Stock**, **B. Chatel**, **M. A. Bouchene**, **V. Blanchet**, **W. Wohlleben**, **M. Motzkus**
Coherent Control in Atoms and Molecules with ultrashort chirped and shaped laser pulses
Manipulation of electrons, atoms and molecules (IOP symposium) (Nottingham, 8th april 2003), I. symposium ed., (2003).
- [I16] **W. Wohlleben***, **J. Degert**, **B. Chatel**, **B. Girard**
A time domain Fresnel lens with coherent control
Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG), (Hannover, Germany), (2003).
- [I17] **V. Blanchet**
Time resolved dynamics in polyatomic molecules with VUV pulses
Needs and Opportunity for Future Advanced Light Sources-Euresco Conference (Propriano), (2004).
- [I18] **V. Blanchet**
Time resolved dynamics in polyatomic molecules with VUV pulses
Applications des sources accordables VUV-X fs combinant accélérateurs et lasers : slicing sur SOLEIL et la proposition ARC-EN-CIEL (Orsay), (2004).
- [I19] **V. Blanchet**
Time resolved dynamics in polyatomic molecules with VUV pulses
ACS's 227th National Meeting (Anaheim, USA), (2004).

[I20] **B. Chatel**

Non linear mixing and shaping from NIR to UV: Towards the control of molecular dynamics
PICNIC network meeting (Paris), (2004).

[I21] **B. Chatel**

Sources ultra-courtes accordables : État de l'art
FEMTO 2004 (Porquerolles), **Université de Saint Etienne**, (2004).

[I22] **J. A. Davis***, **J. J. Wathen**, **V. Blanchet**, **R. T. Phillips**

Time-resolved degenerate four-wave mixing (TR-DFWM) of magneto-excitons in GaAs/AlGaAs single quantum wells (SQW)

The 20th General Conference of the Condensed Matter Division European Physical Society (Prague), (2004).

[I23] **B. Girard***

Le contrôle cohérent
FEMTO2004 (Ile de Porquerolles, 21-24 Sept. 2004), (2004).

[I24] **B. Girard***, **B. Chatel**, **A. Monmayrant**

Coherent control in atoms and molecules with ultrashort laser pulses
Symposium on Control of Molecules and Clusters in Intense Laser Fields (Tokyo University, July 26, 2004), K. Yamanouchi ed., (2004).

[I25] **B. Girard***, **B. Chatel**, **A. Monmayrant**

Coherent control in atoms and molecules with ultrashort laser pulses
Physical Chemistry Colloquium on Ultrafast and Intense Field Phenomena (Tohoku University, Sendai, August 2-3, 2004), (2004).

[I26] **B. Girard***, **B. Chatel**, **A. Monmayrant**

Coherent control with shaped ultrashort laser pulses in atoms and molecules
"Frontiers of Nonlinear Physics" (Nizhny Novgorod, Russia, July 5-12, 2004), A. Litvak and V. Zakharov eds., (2004).

[I27] **B. Girard***, **S. Stock**, **S. Zamith**, **J. Degert**, **A. Monmayrant**, **J. C. Delagnes**, **B. Chatel**, **V. Blanchet**, **M. A. Bouchene**

Contrôle cohérent avec des impulsions laser ultracourtes mises en forme
Symposium « Manipulations d'atomes et de photons », dédié à J. Brosnel (Collège de France, Paris, 16 janvier 2004), S. Haroche and C. Cohen-Tannoudji eds, (2004).

[I28] **S. Stock**, **B. Chatel***, **B. Girard**

Coherent Control in Atoms with ultrashort laser pulses and application to Polychromatic Laser Guided Star
Workshop on Polychromatic Laser Guided Star (Ste-Croix (Ain), 3-4 juin 2004), R. Foy ed., (2004).

[I29] **V. Blanchet**, **B. Chatel***, **G. Turri**, **B. Girard**

Optically induced anisotropy and ultrashort dynamics in Azulene
CLEO(EQEC) Europe (Munich, June 13-16, 2005), (2005).

[I30] **B. Chatel***, **A. Monmayrant**, **B. Girard**

The atomic spirograph: atomic wave function and laser pulse shape measurements from coherent transients
ICOLS (Aviemore, United Kingdom, June 20-24, 2005), (2005).

[I31] **B. Chatel***, **A. Monmayrant**, **B. Girard**

Control of coherent transients

4th workshop on Optimal Control of Quantum Dynamics (Ringberg castle (Munich), dec 2005), I ed., (2005).

[I32] **B. Chatel***, **A. Monmayrant**, **B. Girard**

Control of Coherent Transients using shaped pulses

CLEO (EQEC) Europe (Munich, June 13-16, 2005), (2005).

[I33] **B. Chatel***, **A. Monmayrant**, **B. Girard**

Electric field reconstruction using coherent transients in a two-level system

CLEO (Baltimore, May 23-27, 2005), (2005).

[I34] **J. A. Davis***, **V. Blanchet**, **J. J. Wathen**, **R. T. Phillips**, **A. I. Tartakovskii**, **M. S. Skolnick**

Time resolved of Spin coherence of excitons in a GaAs/AlGaAs quantum dots

OECS (Southampton), (2005).

[I35] **A. Monmayrant**, **A. Arbouet**, **B. Girard**, **B. Chatel***, **A. Barman**, **B. J. Whitaker**

Optimisation of NOPA output pulse shaping using an AOPDF with dispersion self-correction

CLEO (Baltimore, May 23-27, 2005), (2005).

6.6.5. Journaux sans comité de lecture

M. A. Bouchene, **M. Ali**

Determination of optimum pulse for population transfer in atomic and molecular systems

Journal de l'Université d'El Baath, Homs, Syrie (accepté).

7. Spectrométrie d'électrons dans les collisions

7.1. Composition de l'équipe :

Responsables :

A. Bordenave-Montesquieu jusqu'au 1/1/2004
 P. Moretto-Capelle depuis le 1/1/2004

Permanents :

A. Bordenave-Montesquieu (DR2), jusqu'au 22/07/05
 D. Bordenave-Montesquieu (IR), jusqu'au 22/07/05
 A. LePadellec (MCF), depuis le 01/09/04
 P. Moretto-Capelle (CR1)

ATER :

M.	Arnaud	Rentenier		Sept 2003	Juillet 2004
----	--------	-----------	--	-----------	--------------

Doctorant :

M.	Arnaud	Rentenier	MEN	Sept 2000	Sept 2003
----	--------	-----------	-----	-----------	-----------

Visiteur :

Mme	Magda	Staicu-Casagrande	LCAM (Orsay)	Sept 2003	Sept 2003
-----	-------	-------------------	--------------	-----------	-----------

Stagiaires (maîtrise, magistère, DEA, Ecoles, autres) :

M	Sebastien	Bonhommeau	UPS	DEA	Avril 2003	Juin 2003
M	Nicolas	Jelineck	UPS	Maîtrise	Mai 2004	Juin 2004
Melle	Sophie	Massou	UPS	Maîtrise	Mai 2005	Juin 2005
M	Frederic	Franceries	UPS	Maîtrise	Mai 2005	Juin 2005
M	Guillaume	Briere	UPS	Licenc	Juin 2005	Juillet 2005

7.2. Compte-rendu de l'activité scientifique 01/01/2002 au 31/07/05

7.2.1. Introduction

La période 2002-2005 est essentiellement basée sur l'étude des collisions ions atomiques (H^+ , He^+ , He^{2+}) ou moléculaires (H_2^+ , H_3^+) faiblement chargés sur des molécules, dans un domaine d'énergie situé entre 1keV et 130keV. Quelques fins de travaux concernant la spectroscopie haute résolution dans les collisions ions-multichargés ont aussi été réalisés en début de période et ont conduit à publications. Les études sur le fullerène C_{60} ont porté sur la caractérisation des divers processus d'ionisation et de fragmentation (évaporation, fission asymétrique et multifragmentation) en terme d'énergie cinétique des fragments, rôle de l'énergie déposée dans les processus de multifragmentation, analyse en taille des fragments

mais aussi leur quantification en terme de sections efficaces absolues. Ces mesures réalisées pour différents systèmes collisionnels en fonction de l'énergie de collisions montrent des variations très différentes suivants les processus mais aussi en fonction des différents systèmes collisionnels. Une collaboration expérience-théorie s'est instaurée avec l'équipe hispano-française (F. Martin, M. Alcamí de Madrid, M.F. Politis de Paris et P.A. Hervieux de Strasbourg). Cette collaboration avait fait l'objet d'une demande PICASSO qui, hélas, n'a pas aboutie. Pour compléter l'analyse des particules chargées émises lors de la collision, nous sommes aussi intéressés à la spectrométrie des électrons éjectés. Grâce à des corrélations supplémentaires avec les fragments, nous avons mis en évidence que l'énergie de l'électron éjecté et le mode de fragmentation sont liés.

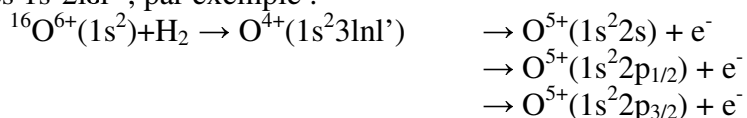
Nous avons débuté une nouvelle activité sur les molécules d'intérêts biologique. Ce thème de recherche s'inscrit dans le cadre général des "dommages induits par les radiations dans les systèmes bio moléculaires" et traite de l'interaction d'un rayonnement ionisant à l'échelle des molécules biologiques telles que les constituants de l'ADN. Le but de cette thématique est de réaliser un pont entre les interactions à l'échelle moléculaire et la radiobiologie. On se propose de caractériser la fragmentation induite par collision de petites bio-molécules, essentiellement des bases de l'ADN et de l'ARN, ainsi que l'émission d'électrons secondaires durant ces collisions. En effet, ces électrons secondaires de basse énergie sont probablement responsables de dégâts supplémentaires dans l'ADN, par attachement dissociatif ou par ionisation suivie de fragmentation. Il est important de connaître le spectre énergétique des électrons émis car ces processus dépendent fortement de leur énergie cinétique. Ces études sont menées par impact de proton à des énergies de collision voisines de 100 keV, ce domaine correspondant à la formation du pic de Bragg dans le milieu biologique où le projectile dépose une dose importante à une profondeur bien localisée (utilisé en proton thérapie). Nous collaborons avec le groupe de B. Farizon l'IPN de Lyon sur ce sujet.

Deux demandes de post-doc sur cette nouvelle thématique ont été faites au CNRS (post-doc 2005) et auprès de l'ARC, et n'ont pas abouti.

Notre équipe a été et est rattachée aux GDR 'Agrégats Dynamique et Réactivité' et 'Agrégation, Fragmentation et Thermodynamique des systèmes isolés' et aux programmes Européen 'LEIF' 2000-2003 qui a été reconduit pour la période 2006-2009 ainsi qu'au réseau Européen COST P9 'Radiation damage in biomolecular systems'—RADAM- site web : <http://www.isa.au.dk/cost/home.html>

7.2.2. Spectroscopie haute résolution des séries $1s^23lnl'$ de l'oxygène et du néon. [1],[2],[3],[6]

La réaction étudiée est la double capture électronique par un ion multichargé héliumoïde (cœur $1s^2$) suivie d'une autoionisation vers les continua d'ionisation les plus proches $1s^22lel'$, par exemple :



Ces expériences ont été réalisées en 1998 à l'AIM (Accélérateur d'Ions Multichargés) au CEN de Grenoble mais ont été exploitées jusqu'en 2003. Peu de données théoriques fiables (énergies et durées de vie des états diexcités) sont disponibles pour analyser de tels spectres d'électrons issus de l'autoionisation des séries de Rydberg $1s^23lnl'$ et donc permettre d'étudier quantitativement le processus de double capture par spectroscopie d'électrons (populations des états, alignement, ...). Les tests antérieurs par d'autres auteurs de ces données théoriques sont trop imprécis pour permettre de conclure sur la validité de certains calculs.

Par une méthode de modélisation des spectres d'électrons, nous avons pu tester pour la première fois toutes les données disponibles concernant les positions et durées de vie d'un grand nombre d'états singulets des séries de Rydberg $1s^2 3lnl' \ ^1L$ ($n = 3$ à 5) calculées par divers auteurs. La haute résolution qui a été atteinte a permis d'observer l'autoionisation vers les composantes de structure fine de l'état final $1s^2 2p_j$. A partir d'une telle modélisation beaucoup de renseignements spectroscopiques ou collisionnels peuvent être obtenus. Ne seront donnés ici à titre d'exemple que les tests spectroscopiques. Les positions des états mesurés, déduites des positions des raies d'électrons observées qui sont décalées et déformées par une interaction coulombienne avec l'ion cible résiduel (effet PCI), sont en très bon accord avec certaines données théoriques, souvent à mieux que 0.05 eV. Ce chiffre montre la précision atteinte dans nos mesures et dans la méthode d'analyse ; seulement une précision de l'ordre de 0.3 eV était auparavant atteinte qui ne permettait pas une identification correcte des transitions et donc des états peuplés dans la réaction. Cette identification a alors permis de déduire d'autres données telles que le rapport de branchement pour l'autoionisation vers les continua $1s^2 2s$ et $1s^2 2p$; les données théoriques pour l'oxygène sont en bon accord entre elles ainsi qu'avec nos expériences.

Cette activité est maintenant totalement arrêtée.

7.2.3. Collisions ion-fullerenes

Les réactions avec les ions légers aux énergies considérées sont dues aux excitations électroniques et le temps de collision (\approx fs) est court devant le temps nécessaire à la fragmentation (\approx ps).

7.2.3.1. Mesures des sections efficaces absolues [8]

Jusqu'à lors, les données expérimentales concernant les taux de production des divers fragments étaient donnés en taux relatifs excluant une comparaison directe des systèmes en unité absolue. Nous donc avons entrepris de relier tous les systèmes collisionnels entre eux et l'obtention des sections efficaces en unité absolue s'est faite via la collision $H^+ + C_{60}$ où des données existaient entre 0.2 et 2MeV (Japon). Ces données ont servi à une équipe de Bielefeld qui ont prolongé les sections efficaces jusqu'à 100keV. Désormais les sections efficaces de production d'états de charges sont connues entre 1keV et 2MeV pour ce système. Les résultats sont donnés sur la figure 1 : un bon accord est obtenu sur les sections efficaces

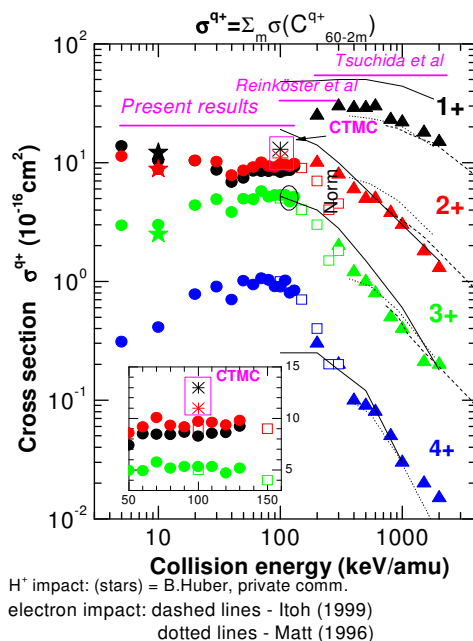


Figure 1 : Sections efficaces de production de charge dans le système $H^+ + C_{60}$

σ^{q+} avec $q>1$ mais un facteur 2 persiste entre nos valeurs et celles de Tsuchida pour la production de $1+$. Nous avons réalisé un calcul CTMC (Classical Trajectory Monte Carlo method) basé sur un modèle de jellium du C_{60} existant dans la littérature pour évaluer les sections efficaces de production des ions $1+$ et $2+$: un bon accord a été obtenu.

Les corrélations electron-fragments nous ont permis de séparer les contributions dues à la capture et à l'ionisation dans la formation du C_{60}^+ , et ont montré une loi d'échelle avec la vitesse de collision valable pour tous les ions projectiles (y compris les ions moléculaires). Ceci montre que la structure du projectile n'intervient pas, i.e. que les collisions se passent à grand paramètre d'impact où, de plus, l'énergie déposée est faible.

En ce qui concerne le processus de multifragmentation où la molécule de C_{60} est complètement détruite, les sections efficaces correspondantes évoluent rapidement avec la vitesse de collision ainsi qu'avec le système collisionnel. Pour H^+ , la section efficace passe par un maximum situé aux alentours de 60keV/u, dans le cas de H_2^+ et H_3^+ , les sections efficaces sont plus importantes et augmentent très rapidement avec l'énergie de collision, un maximum semble se dessiner pour H_2 à la même vitesse que pour H tandis que H_3 ne présente aucun maximum dans le domaine énergétique considéré. Cette relation d'ordre entre les sections efficaces pour H , H_2 , H_3 est analogue à l'énergie déposée dans la collision. Pour les ions Hélium, les sections efficaces dépendent fortement de la charge, et si la dépendance

obtenue pour He^+ est voisine de H_3^+ , la section efficace de multifragmentation pour He^{2+} est constante à partir de 20keV/uma et voisine de la section géométrique du $C_{60} = \pi \cdot \langle R_{C60} \rangle^2$.

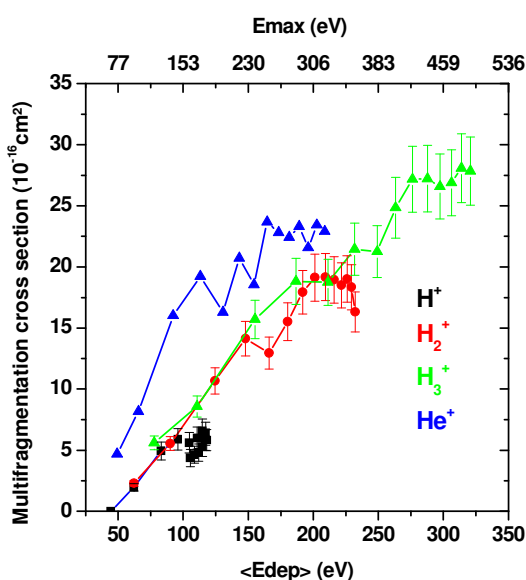


Figure 2 : Dépendance des sections efficaces de multi-fragmentation en fonction de l'énergie déposée moyenne $\langle E_{dep} \rangle$

Si l'on représente les sections efficaces de multifragmentation non plus en fonction de paramètres cinématiques (vitesse de collision...) mais en fonction de l'énergie déposée, une loi commune est observée. On notera tout de même un léger décalage de la courbe avec He^+ comme projectile.

Nous avons aussi étudié le système collisionnel $He^{2+}+C_{60}$ suite à une collaboration théorie-expérience engagée avec l'équipe hispano-française (Univ Autonoma de Madrid, Univ. de Metz, Univ ParisVI), sur la comparaison des sections efficaces de simple et double capture. La difficulté expérimentale a été de descendre en énergie jusqu'à 2keV, limite initiale supérieure des calculs moléculaires. Les calculs ont porté sur la formation des ions He^+ (simple capture) et He^0 (double capture), les mesures sur les sections efficaces absolues de formation des ions C_{60}^+ et C_{60}^{2+} (on observe très peu de fragmentation). Grâce aux expériences d'Afrosimov en unité relative, il est possible de relier l'état de charge de l'Hélium après collision et la charge du fullerène. Comme l'on peut le constater sur la figure3, un accord expérience-theorie remarquable est obtenu compte-tenu de la complexité du système (la partie théorique a nécessité deux années de travail). Une publication commune va être rédigée prochainement.

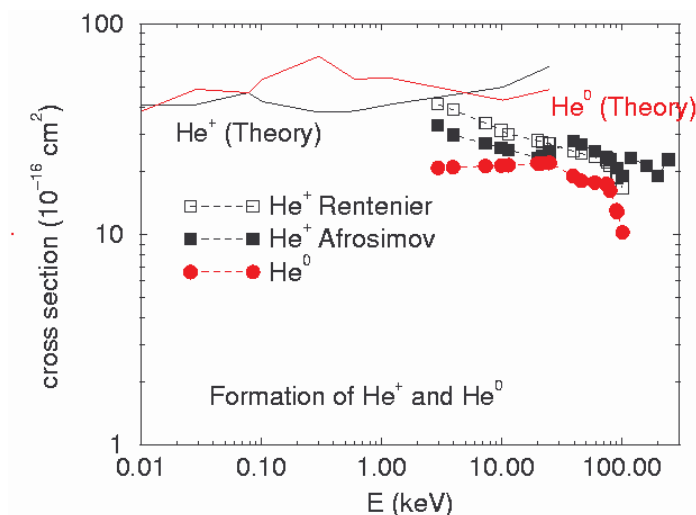


Figure 3 : Comparaison theorie-experience des sections efficaces de capture électronique dans la collision ${}^4\text{He}^{2+} + \text{C}_{60}$

7.2.3.2. Fragmentation du C_{60}

7.2.3.2.1. Fission asymétrique et évaporation des ions C_{60}^{r+} ($r = 2-4$) * [6], [11], [12]

Grâce à l'amélioration de notre dispositif expérimental, nous avons pu pour la première fois donner une description complète de la fission asymétrique des ions C_{60}^{2+} . Cela nous a permis de comparer les distributions de masses corrélées fragment léger- fragment lourd en fonction de la charge initiale du fullerène. Lorsque la charge du fullerène augmente, la taille du fragment lourd augmente (et la taille du fragment léger diminue). Par contre les distributions de taille corrélées à une taille de fragment donné sont identiques ! Si l'on compare ces mêmes distributions avec d'autres systèmes collisionnels pouvant donner lieu à des transferts énergétiques plus importants (collision avec H_2 et H_3) les mêmes résultats sont obtenus et il en est de même pour des ions multichargés de basse vitesse (résultat de S.Martin et al du LASIM, Lyon). Ce comportement 'universel' du processus de fission semble paradoxal du fait que les rapports de branchement doivent dépendre de l'énergie interne – température- du fullerène (description d'Arrhenius, RRK...). L'interprétation que nous avançons est que lorsque l'énergie interne augmente, les ions C_{60} vont rester stables sur la durée d'observation, ensuite les processus 'doux' de fission et d'évaporation vont prendre le relais mais si l'énergie interne devient suffisante la voie de fragmentation par multifragmentation devient dominante et des lors les voies de fission/évaporation n'existent que dans un domaine limité d'énergie interne que nous avons évalué s'étendre entre 40 et 80 eV.

7.2.3.2.2. Multifragmentation : distribution de taille et multiplicité [5], [11]

Nos résultats ont montré que la distribution en taille des fragments obéit à une loi d'échelle si l'on considère l'énergie déposée comme paramètre et est donc indépendante du type de projectile (une dépendance du même type a été vu sur les sections efficaces de multifragmentation figure 2). Nous avons aussi réalisé une étude de la multifragmentation au travers de la théorie de la percolation qui est souvent utilisée pour caractériser les distributions en taille des fragments (en particulier en physique nucléaire) et nous avons regardé si nos données étaient compatibles ou non avec un comportement critique. Cela a été réalisé grâce à une analyse événement par événement de la fragmentation en suivant les méthodes suggérées par Campi et Bauer qui utilisent les corrélations entre moments d'ordre k correspondant à chaque événement. Les logarithmes des moments d'ordre 3 et 5 en

fonction du log du moment d'ordre 2 sont donnés sur la figure4 : une loi linéaire est obtenue, compatible avec un comportement critique de la fragmentation du C₆₀.

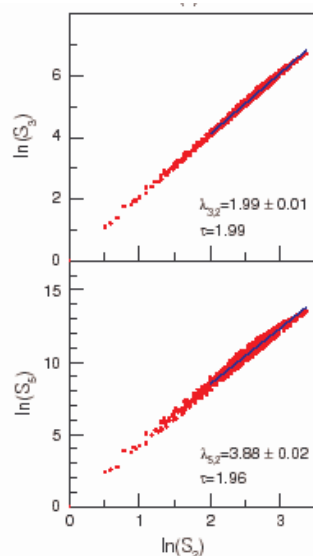


Figure4 : Ln des moments d'ordre 3 et 5 vs le Ln du moment d'ordre 2 (chaque point représente un événement)

A partir de ces pentes on peut extraire l'exposant critique $\tau=1.98\pm 0.02$ qui se trouve être plus proche de celui calculé pour un réseau 2D (2.06) que pour un réseau 3D (2.2) en accord avec le fait que le C₆₀ est un objet 2D (coquille creuse). Cette étude a suscité de nombreuses discussions fructueuses avec M. Belkacem du Laboratoire de Physique Théorique (IRSAMC).

7.2.3.3. Energétique des particules émises

7.2.3.3.1. Les fragments [7]

Lors de la fragmentation de la molécule de C₆₀, les divers petits fragments ont une énergie cinétique non nulle. On s'est attaché à mesurer cette énergie cinétique pour les petits agrégats de carbone C_n⁺, n=1..12 et voir comment évoluent ces énergies avec les conditions expérimentales. La distribution en énergie des fragments est obtenue à partir des spectres de temps de vol : on génère par simulation Monte-Carlo des spectres de temps de vol pour un fragment donné émis isotropiquement avec des énergies cinétiques données, puis on décrit le spectre mesuré par une combinaison linéaire des spectres calculés, l'ensemble des coefficients représentant le spectre en énergie. La compilation des énergies cinétiques les plus probables ainsi que les moments emportés par les fragments montre que tous les fragments ont approximativement la même quantité de mouvement quelle que soit leur taille, il en résulte une énergie cinétique inversement proportionnelle à la masse et ce quel que soit le système collisionnel. Ceci montre que l'énergie cinétique des fragments est uniquement une caractéristique moléculaire telle que le KER. Un modèle simple de l'explosion coulombienne à 2, 3 et 4 fragments est réalisé en supposant que les fragments de masse m₁...m_n sont situés sur une sphère du même rayon que le C₆₀ et se repoussent (plus grande distance entre les fragments). Après évolution des équations du mouvement et moyenne sur les n-1 autres masses, on peut déduire la variation de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique en fonction de la masse des fragments : un bon accord quantitatif est obtenu même si la variation en énergie cinétique calculée varie moins vite (n^{-1/2}) que la dépendance expérimentale (n⁻¹)

7.2.3.3.2. Les électrons [8]

Dans la grande majorité des collisions, de nombreux électrons sont émis. Si de nombreuses études ont eu lieu sur la caractérisation de l'état du fullerène après excitation, la caractérisation des électrons émis n'a reçu que peu d'intérêt (2 publiés recensés !!!), nous

avons donc réalisé une étude systématique de spectrométrie d'électrons afin de voir si ceux-ci amènent une information particulière. Les spectres d'électron se distinguent de ceux obtenus avec les atomes par un déficit d'électrons de faibles énergies (qui ne peut être attribué à un problème expérimental d'efficacité) et présente un maximum situé au voisinage de 10-20eV. Ce déficit en électron de faibles énergies a été reproduit par nos calculs CTMC à partir d'un modèle jellium du C_{60} , et provient des moments angulaires élevés des orbitales externes qui forment une barrière de potentiel centrifuge élevée. Nous avons ensuite réalisé un calcul quantique des spectres d'électrons (SCA-PWBA), et les mêmes résultats qualitatifs sont obtenus sur le déficit des électrons de basse énergie. En revanche, on assiste à l'apparition de résonances de formes conduisant à des raies sur le spectre calculé. Ce type de résonances a aussi été observé dans des calculs plus complexes impliquant une description plus réaliste du fullerène (Gianturco et al). Nous ne les avons pas mises en évidence expérimentalement, nous pensons que cela vient que nos C_{60} ne sont pas froids : ils vibrent et les résonances se brouillent.

Afin de relier la spectroscopie d'électrons et la fragmentation de la molécule, nous avons réalisé une expérience de spectrométrie en corrélation dans la collision $H_3^+ + C_{60}$ à 60keV qui a montré que plus le processus de fragmentation est violent et correspond à des dépôts d'énergie important, plus les électrons ont d'énergie cinétique. Il y a donc bien une liaison entre les deux aspects (voir figure5) où l'on considère un mécanisme à faible dépôt d'énergie i.e. formation de C_{60}^+ et un mécanisme à fort dépôt d'énergie i.e. la multifragmentation. Via le modèle de gaz d'électrons libres formulé par Lindhart et Winter appliqué au C_{60} , nous avons montré qu'un fort dépôt d'énergie se fait pour des paramètres d'impact $b \approx 6ua$ tandis que peu d'énergie est déposée pour des $b > 8ua$. Les calculs SCA des spectres d'électrons résolus en paramètres d'impact illustrent cet état de fait : le paramètre clé est le paramètre d'impact de la collision.

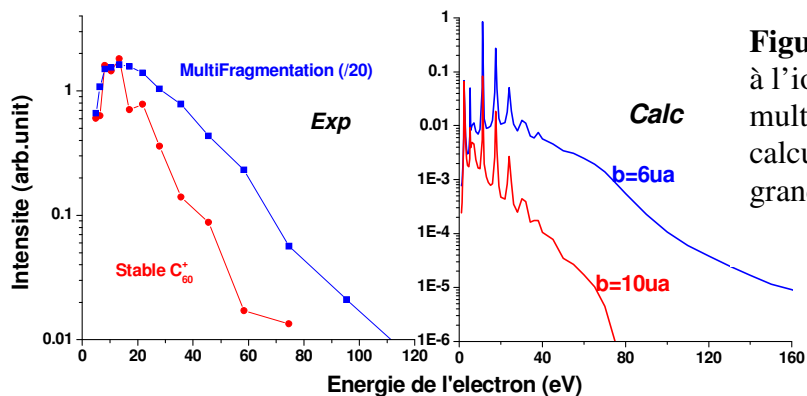


Figure 5 : Spectre d'électron associé à l'ionisation simple du C_{60} et à la multifragmentation (gauche). A droite calculs des spectres électroniques à grand et moyen paramètre d'impact

7.2.4. Collisions Proton-Biomolécules

Les effets génotoxiques des radiations ionisantes sont produits non seulement par l'impact direct des radiations ionisantes, mais sont aussi induits par des espèces secondaires. Il a récemment été suggéré par L.Sanche du dpt de Radiobiologie de l'Université de Sherbrooke (Canada) que les cassures simple et double brins de l'ADN induites par des électrons de faibles énergies (eV) pouvaient être expliquées par un mécanisme d'attachement dissociatif sur les bases de l'ADN, que l'on reproduit sur les bases isolées. Ainsi les dommages induits par les radiations peuvent être compris par des mécanismes au niveau de la molécule unique. A noter que dans les années 1990, l'équipe de A.Chetioui (GPS) avait relié

la mort cellulaire après exposition à des rayonnements X à un processus élémentaire de physique atomique : l'ionisation en couche interne et la cascade Auger qui en découle.

La mort cellulaire étant due aux altérations de l'ADN qui est la cible principale des radiations, nous nous intéressons aux réactions proton-petites bio-molécules en phase gaz. Nous travaillons sur les bases de l'ADN (thymine, cytosine, adénine, guanine) ainsi que sur l'uracil (base de l'ARN) dont nous caractérisons la fragmentation moléculaire ainsi que l'émission électronique –nous sommes les seuls à le faire-. Des prémanips sur l'uracil ont été entreprises début 2004 et les expériences proprement dites ont débuté avec l'arrivée de A. Le Padellec dans l'équipe.

7.2.4.1. Fragmentation moléculaire

Les jets de bases d'ADN, ARN sont produits par sublimation de poudres commerciales, et une première étape a consisté à connaître les températures de fonctionnement de notre four pour chaque molécule qui seront appliquées pour la mesure des spectres électroniques. Ces tests sont faits par spectro de masses et ont naturellement conduit à l'étude de la fragmentation induite par collision dans le domaine 25-100 keV. Une illustration des spectres de temps de vol issus de la fragmentation des bases pyrimidiques est donnée dans la figure 6 (les bases puriques ont été aussi étudiées). Contrairement à ce que l'on observe dans les collisions avec le C₆₀, il n'y a pas de modifications significatives des spectres de masses avec l'énergie d'impact dans le domaine 25-100keV. On notera aussi que, bien que les molécules aient une structure voisine, les spectres de masse sont assez différents et que de nombreux fragments sont créés que nous pouvons identifier et quantifier. En particulier certains fragments montrent l'existence de réarrangement moléculaire (notamment la masse 44 pouvant être attribué à l'espèce CNOH₂⁺). Ces fragments dans la molécule d'ADN pourront à leur tour faire des dégâts supplémentaires (attaque chimique).

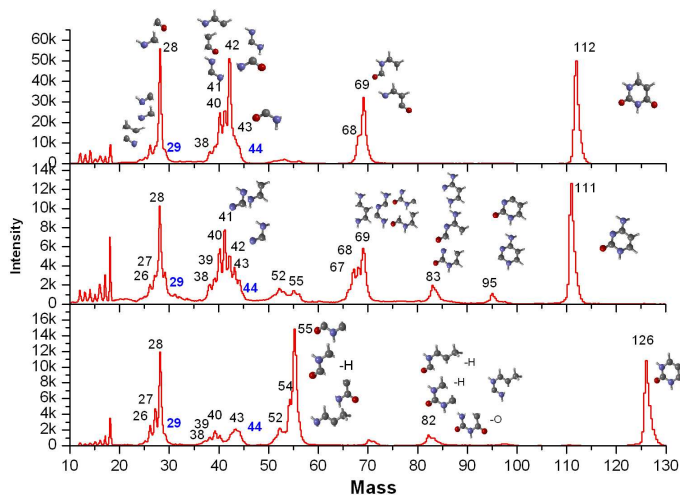


Figure 6 : Spectres de fragmentation de l'Uracil, Cytosine et Thymine

Les molécules multi-ionisées peuvent se relaxer en émettant plusieurs fragments chargés, accessibles à nos techniques de multicorrélation. On a accès en particulier aux rapports de branchement des différentes voies de dissociation et, par exemple, les couples de fragments chargés 28+43 et 28+41, 40+43 sont préférentiellement observés dans le cas de la thymine et cytosine, respectivement. L'énergétique de la dissociation peut être obtenue par l'examen des îlots de corrélation et outre la connaissance des énergies cinétiques (de l'ordre de l'eV) emportés par les fragments, on peut obtenir des renseignements supplémentaires sur la forme des fragments émis. L'analyse de traces 'parasites' dans les spectres de corrélation a mis en évidence, dans le cas de l'Adénine, l'existence d'états métastables de durée de vie de l'ordre de la 100ns quant à la fragmentation (figure7).

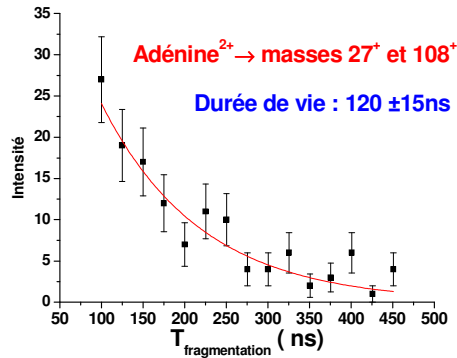


Figure 7 : mise en évidence d'états de longue durée de vie quant à la fragmentation

7.2.4.2. Emission électronique

L'importance des électrons secondaires émis à la suite de l'interaction d'un rayonnement ionisant avec le milieu biologique a été récemment démontrée par l'équipe de L. Sanche du dept de radiobiologie de l'Univ. de Sherbrooke (Canada), et les dommages qu'ils vont pouvoir générer au niveau de l'ADN par cassure simple et double brins dépendent de leurs énergies cinétiques. A basse énergie cinétique (<20 eV) le mécanisme d'attachement dissociatif sur les bases va être important tandis qu'à plus forte énergie (<50 eV) les processus d'ionisation et de fragmentation 'directe' vont prédominer. Il est donc nécessaire de connaître le spectre en énergie des électrons éjectés mais aussi les rendements absolus (sections efficaces doublement différentielle) pour pouvoir comparer les molécules entre elles. Les spectres d'électrons ont été obtenus de manière comparable cible par cible en supposant (et vérifiant) la non-dérive en densité du jet puis la normalisation en section absolue s'est faite via le système collisionnel H_3^+ base à 25 keV. Calant le spectromètre d'électron à 50 eV, nous avons, en parallèle, monitoré la diffusion élastique des protons du projectile à 90° (H_3 comme projectile est équivalent à 3 H à 8.3 keV i.e. un 'faisceau' 3 fois plus important pour une énergie 3 fois plus basse où la section efficace de diffusion est plus importante) : le lien entre ces deux intensités électronique et proton diffusé dépend, entre autre, de la section efficace de diffusion élastique et aussi du profil de densité du jet issu du four. Les sections efficaces de diffusion élastique ont été évaluées avec l'aide de P. Caffarelli de l'équipe ion-surface du LCAR et nous avons fait appel au Dr A. Bouckabache du LAAS (Laboratoire d'Automatisme et d'Analyse des Systèmes) de Toulouse qui a réalisé pour nous des mesures d'épaisseur de dépôt d'Uracil sur plaque de verre.

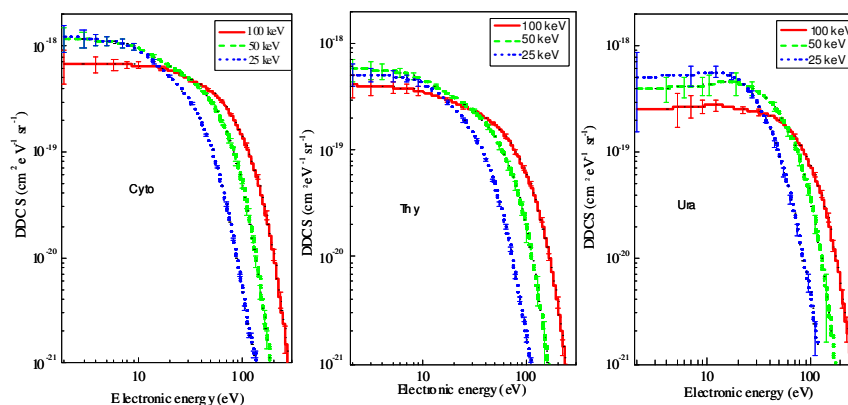


Figure 8 : spectre d'électrons mesurés à 35° dans les collisions proton-bases pyrimidique

Nos résultats montrent une forte production d'électrons de faible énergie quelles que soient les bases considérées (la spectroscopie électronique n'a pas encore été réalisée sur l'adénine et la guanine)

7.2.5. Projets

7.2.5.1. Fullerènes et molécules associées

Les molécules de fullerènes sont, depuis une vingtaine d'années, le sujet de nombreuses études. Parmi celles-ci, un certain nombre avait pour but de la création d'endofullerènes (piégeage d'un atome dans la cage du fullerène). En effet, la réactivité et le processus de formation de ces derniers ont notamment un intérêt pour la recherche médicale (amélioration des techniques d'imagerie ou nouvel agent thérapeutique). Il est également prédit que certains endofullerènes (utilisation d'atomes alcalins) posséderaient des propriétés 'super-conductrices'. Dans le cadre d'une collaboration avec le CIRIL (Caen) (B. Huber et B. Manil) nous nous proposons d'étudier la possible formation d'endofullerènes par collision entre une molécule de C_{60} et un ion possédant une énergie cinétique de l'ordre de quelques eV. Lors de cette collision, il est possible, par capture électronique, d'affaiblir certaines liaisons carbone-carbone du fullerène et d'obtenir ainsi un élargissement de l'un des hexagones ou pentagones formant le C_{60} . Celui-ci offrira la possibilité au projectile de pénétrer à l'intérieur de la cage du fullerène, et d'y être stabilisé, vu sa très faible énergie cinétique. Cette expérience se déroulera sur la ligne TBE (Très Basse Energie) de l'installation ARIBE (Accélérateur pour les Recherches Interdisciplinaires avec des ions de Basse Energie) de Caen, qui permet de produire des faisceaux d'ions multichargés avec une énergie de l'ordre de 1 eV. La formation d'endofullerènes sera observée grâce à une spectrométrie de masse par temps de vol de haute résolution ; utilisation d'un spectromètre de type réflectron possédant une résolution en masse de l'ordre de 15000. Une demande de financement a été déposée et acceptée par le GDR 'Agrégation, Fragmentation et Thermodynamique des systèmes isolés' pour des rencontres préparatoires.

Une création de PPF par C. Joblin (CESR) et F. Spiegelman (LPQ, IRSAMC) portant sur 'Molécules et grains du laboratoire à l'Univers' est en cours de dépôt, et notre équipe participerait à la thématique 'Transfert d'énergie et fragmentation de macromolécules et nanograins'. Suite à la visite de C. Joblin, une collaboration concernant le corranulène est envisagée : nos études par impact d'ion sont complémentaires aux expériences de photoionisation et photodissociation menées au CESR. De plus le corranulène $C_{20}H_{10}$ représentant $1/3$ du C_{60} , il est très intéressant de comparer ces modes de fragmentation avec ceux du C_{60} .

7.2.5.2. Bio-molécules

La caractérisation 'complète' de l'émission électronique dans les collisions ion-biomolécule passe non seulement par la connaissance du spectre énergétique mais aussi par l'information angulaire, i.e. par la connaissance des distributions angulaire des électrons. Ces données sont importantes dans le calcul des traces des ions dans le milieu biologique. Ces études nécessitent le développement d'une nouvelle détection d'électrons qui mesure à la fois les énergies et les angles d'émission ainsi que la corrélation avec les modes de fragmentation. Cet appareillage, dont l'étude a commencé, sera transporté ou dupliqué pour aller sur le dispositif de B. et M. Farizon à l'IPN de Lyon, avec qui nous collaborons. Les expériences prévues avec le groupe de l'IPN concernent les collisions proton/ biomolécules solvatées (avec contrôle du nombre de molécules d'eau attachées) afin de mieux reproduire le milieu bio et de voir les modifications engendrées par la solvation sur les modes de fragmentation ainsi que sur l'émission d'électrons secondaires.

Sur notre dispositif de Toulouse, suite à une discussion avec M. Malet-Martino du laboratoire de 'Synthèse et Physico-Chimie de Molécules d'Intérêt Biologique' (SPCMIB, UPS) nous comptons nous intéresser aux Halo-Uracil tel que le 5FU. Cette molécule est

utilisée dans les traitements anti-cancer, et est radio sensibilisante, ie les effets des rayonnements ionisants sont augmentés en sa présence. Se pose alors la question de comprendre pourquoi une molécule est radio sensibilisante et nous allons chercher à voir s'il existe des particularités par rapport aux autres bases lorsque l'on irradie ce type de molécule. (Un effet particulier par irradiation électronique a été observé par l'équipe de T. Märk (Innsbruck). Vu la toxicité de ces molécules, un système de piège à froid doit être installé dans la chambre de collision.

Les dommages importants occasionnés à l'ADN et qui provoquent la mort cellulaire ou des mutations sont conditionnés par les cassures des brins de l'ADN. La structure la plus petite comportant l'élémentaire du brin est le nucléotide qui comporte un phosphate, un sucre (brin) auquel est attachée une base. Nous nous sommes procuré les nucléotides de l'adénine que l'on trouve dans l'ADN (damp) et l'ARN (amp) en version monohydraté ou non. Ceci nous permettra de voir l'influence du sucre mais aussi de la molécule d'eau. Les expériences sont prévues en phase gaz mais si les molécules sont trop délicates à sublimer correctement, nous envisageons de les déposer sur des surfaces pour pouvoir les irradier et les étudier.

Ceci est un des points de départ qui a suscité un rapprochement-fusion entre les équipes de collision du LCAR c'est à dire l'équipe 'Ion-Surface' dirigée par M. Richard-Viard et la nôtre. Ce rapprochement permet de réaliser des activités complémentaires phase gaz-phase déposée, et d'étendre les études à des systèmes plus complexes (et généralement plus fragiles) mais aussi de suppléer à la perte de chercheurs par départ à la retraite ainsi qu'à la difficulté de recrutement. Des pré-manips ont été réalisées quant à la diffusion d'ion Ar (4 keV) sur une surface d'or partiellement recouverte d'Uracil qui montrent la nécessité de préparer in situ le dépôt, et de chauffer très légèrement l'échantillon pour éviter pollution dans l'enceinte.

7.2.6. Activités extra équipe de A.Le Padellec

En marge des activités du groupe « Spectrométrie d'électrons dans les collisions » sur les molécules d'intérêt biologique, je poursuis des travaux dans le cadre de collaborations déjà bien établies sur les processus d'association ionisante à l'UCL en Belgique, ainsi que sur des collisions entre agrégats carbonés / hydrocarbonés et atomes d'hélium (étude de l'excitation, de la capture électronique et de la dissociation) au Tandem situé à l'université d'Orsay.

7.2.6.1 Processus d'association ionisante.

L'ensemble de ces travaux concerne le processus d'association ionisante qui associe une paire d'ions positif et négatif (atomes et/ou molécules) pour produire un ion moléculaire et un électron dans le canal de sortie. Nous avons mesuré les sections efficaces intégrales pour la formation d'un certain nombre d'ions diatomiques et triatomiques d'intérêt atmosphérique et astrophysique. Pour certains de ces derniers, nous avons pu mettre en évidence la compétition entre mécanismes d'abstraction et d'insertion dont relève le processus d'association ionisante.

De manière plus globale, mon intérêt pour ce travail a été avivé par une étude que j'avais menée antérieurement sur la formation en paire d'ions, processus inverse de celui d'association ionisante. L'opportunité d'étudier ces processus m'a amené à réfléchir et à approfondir le concept de bilan détaillé (principe de microréversibilité)

Collaboration avec :

- Groupe « Physique atomique et moléculaire » - PAMO de l'Université catholique de Louvain la Neuve (Dr X Urbain).

Cette collaboration a déjà donné lieu à cinq articles publiés dont quatre dans des journaux à comité de lecture :

- *EPJD* (2)

- *JPhysB* (1)

- *Phys.Scripta* en tant que seul auteur (1)

- *Kluwer Academic/Plenum Publishers* (Harbound, ISBN 0-306-47765-3, Août 2003, Ed: SL. Guberman - p.343 –) (1).

7.2.6.2. Collisions d'agrégats carbonés / hydrocarbonés sur des atomes d'hélium : capture, excitation, dissociation.

Cette collaboration a été initiée suite à un article publié en 2001 sur la destruction d'agrégats de carbone chargés négativement par impact électronique (« Electron Impact Detachment and Dissociation on C_4^- anions in the heavy ion storage ring CRYRING » by A. Le Padellec *et al*, *J. Chem. Phys.*, 115, 10671, (2001)). Je participe régulièrement depuis Juin 2003 aux campagnes de mesures au TANDEM d'Orsay (1 semaine par an). Expérimentalement, des détecteurs à barrière de surfaces sont mis à profit dans un régime courant-tension qui permet la reconnaissance de forme des signaux, et il est alors possible de mesurer les rapports de branchement dans les différents canaux de capture, d'excitation et de fragmentation. Une collaboration très active a lieu en parallèle avec des équipes théoriques, dont celle de F Spiegelman du LPQ UPS – Toulouse qui développe des théories statistiques et de chimie quantique.

Collaboration avec :

- Groupe LCAM / IPN de l'Université Paris 11 - Orsay (Drs Wohrer-Béroff et Chabot).

Cette collaboration a déjà donné lieu à trois articles publiés dont deux dans des journaux à comité de lecture :

- *PRL* (1)

- *PRA* (1 accepté)

- *World scientific* (1)

7.3. Les collaborations nationales et internationales

-F. Martin, M. Alcamí (UAM Madrid)-PA Hervieux (Univ. Strasbourg)-M.F. Politis (GPS, Paris) sur les interactions ions- C_{60} , fragmentation du C_{60} : énergie d'activation

-M. et B. Farizon (IPN, Lyon) sur les interactions avec les biomolécules

-Groupe « Physique atomique et moléculaire » - PAMO de l'Université catholique de Louvain la Neuve (Dr X Urbain).

-Groupe LCAM / IPN de l'Université Paris 11 - Orsay (Drs Wohrer-Béroff et Chabot).

7.4. Publications

7.4.1. Publications de l'équipe

7.4.1.1. Articles dans des revues avec comité de lecture

- [1] A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle and D. Bordenave-Montesquieu, 'Comments on Experimental study of single- and double-electron transfer in slow $\text{Ne}^{8+} + \text{He}$ collisions using photon and electron spectroscopy' *Phys. Rev. A* 65 (2002) 066701
- [2] A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle and D. Bordenave-Montesquieu, 'Part I - High resolution electron spectroscopy of the $1s^2 3lnl'$ Be-like series in oxygen and neon. Test of theoretical data. I-Experimental method and theoretical background.' *J. Phys. B* 36 (2003) 47-64
- [3] A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle and D. Bordenave-Montesquieu, 'Part II - High resolution electron spectroscopy of the $1s^2 3lnl'$ Be-like series in oxygen and neon. Test of theoretical data. II-Experimental results' *J. Phys. B* 36 (2003) 65-92
- [4] G. Laurent, M. Tarisien, X. Fléhard, P. Jardin, L. Guillaume, P. Sobocinski, L. Adoui, A. Bordenave-Montesquieu, D. Bordenave-Montesquieu, J.Y. Chesnel, F. Frémont, D. Hennecart, E. Liénard, L. Maunoury, P. Moretto-Capelle et A. Cassimi, 'Coincident Auger electron and recoil ion momentum spectroscopy for low-energy ion-atom collisions' *NIM B* 205 (2003) 546-549
- [5] A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu and A. Bordenave-Montesquieu, 'Multifragmentation of C_{60} induced by He^{2+} impact ($E < 60 \text{ keV/u}$) and investigated by multicorrelation technique' *NIM B* 205 (2003) 656-660
- [6] A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle and D. Bordenave-Montesquieu, 'An accurate test of calculated positions and lifetimes for $\text{Ne}^{6+}(1s^2 3lnl')^1L$ states ($n=3-5$) using a high resolution electron spectroscopy' *NIM B* 205 (2003) 74-77
- [7] A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle and A. Bordenave-Montesquieu, 'Kinetic energies of charged fragments resulting from multifragmentation and asymmetric fission of C_{60} molecule in collisions with monocharged ions (2 to 130 keV)' *J. Phys. B* 36 (2003) 1585-1602
- [8] P. Moretto-Capelle, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu, and A. Bordenave-Montesquieu, 'Electron capture, ionization and fragmentation in collisions of singly-charged ions with C_{60} ' *Physica Scripta*, Vol. T110 (2004) 325-331
- [9] A. Rentenier, A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle and D. Bordenave-Montesquieu, 'Asymmetric fission and evaporation of C_{60}^{q+} ($q=2-4$) fullerene ions in ion - C_{60} collisions. I- Present proton results' *J. Phys. B* 37 (2004) 2429-2454
- [10] A. Rentenier, A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle and D. Bordenave-Montesquieu, 'Asymmetric fission and evaporation of C_{60}^{q+} ($q=2-4$) fullerene ions in ion - C_{60} collisions. II- Dependent on collisional processes' *J. Phys. B* 37 (2004) 2455-2465

[11] A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu and A. Bordenave-Montesquieu, 'Analysis of fragment size distribution in collisions of monocharged ions with C₆₀ molecule', J. Phys. B 38 (2005) 789-806

[12] D. Bordenave-Montesquieu, A. Bordenave-Montesquieu, A. Rentenier and P. Moretto-Capelle, 'Asymmetric fission and evaporation of C_{6q}⁺ (q=2-4) fullerene ions in ion - C₆₀ collisions. III- Universal collisional behaviour for fission' J. Phys. B 38 (2005) 1037-1049

[13] A. Le Padellec, 'Partial near threshold cross sections for the Associative Ionization to form CO⁺, NO⁺ and O₂⁺', Phys. Scripta 71(6), 621, (2005).

[14] F. Mezdari, K. Wohrer, M. Chabot, G. Martinet, S. Della Negra, P. Désesquelles and A. Le Padellec, 'Ionisation cross sections of small cationic carbon clusters in high energy collisions with helium atoms and stability of multiply charged species' Accepted Phys. Rev. A

7.4.1.2. Conférences invitées

P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu, A. Rentenier and A. Bordenave-Montesquieu 'Multi-fragmentation of C₆₀ induced by low charged ions' 3rd Annual LEIF Meeting (Igls/Innsbruck, Autriche 2002)

A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, A. Rentenier and D. Bordenave-Montesquieu 'Electron spectroscopy and fragmentation of C₆₀ in collisions with monocharged ions', 4th Annual LEIF Meeting, (Belfast, Irlande, 2003)

P. Moretto-Capelle, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu, and A. Bordenave-Montesquieu 'Electron capture, ionization and fragmentation in collisions of singly-charged ions with C₆₀', 23th ICPEAC (Stockholm, Suede, 2003)

P. Moretto-Capelle, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu, and A. Bordenave-Montesquieu 'Secondary electron emission in proton-uracil collision: preliminary results' Radiation damage in biomolecular systems (Lyon, France, 2004) (*exposé donné par M. Richard-Viard*)

7.4.1.3. Posters

P. Moretto-Capelle, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu and A. Bordenave-Montesquieu 'Cross section for ion production in ⁴He²⁺+C₆₀ collision and comparison with H_n⁺ (n=1-3) impact (2 – 60 keV/amu)' 11th International Conf. on the Physics of Highly Charged Ions Caen (2002)

A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu et A. Bordenave-Montesquieu 'Ionisation et fragmentation du C₆₀ induite par collisions avec des ions multichargés', PAMO (Bourges, 2002)

P. Moretto-Capelle, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu and A. Bordenave-Montesquieu 'Ionization, capture and fragmentation cross sections in collisions between singly charged ions and C₆₀ (2 -130 KeV)' 23th ICPEAC (2003) Stockholm

A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu and A. Bordenave-Montesquieu, 'Fragmentation of fullerene C60 studied with percolation theory: presence of a critical behaviour?' 8th ECAMP (Rennes-France) (2004)

A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu and A. Bordenave-Montesquieu, 'Electron emission correlated to fragmentation in H3+C60 collision' 8th ECAMP (Rennes-France) (2004)

A. Le Padellec, P. Moretto-Capelle, 'Collisions between protons and biomolecules: electron emission and molecular fragmentation' Radiation damage in biomolecular systems (Postdam, Allemagne, 2005)

F. Mezdari, G. Martinet, S. Della Negra, H. Hamrita, L. Lavergne, P. Désesquelles, A. Le Padellec, D. Gardès, M. Barat, M. Chabot and K. Wohrer, 'Fragmentation of multiply-charged carbon clusters' ICPEAC 2005 , Rosario, (Argentine) 20-26 July 2005

F. Mezdari, G. Martinet, S. Della Negra, H. Hamrita, L. Lavergne, P. Désesquelles, A. Le Padellec, D. Gardès, M. Barat, M. Chabot, K. Wohrer, S. Diaz-Tendero, P.A. Hervieux, M. Alcami, and F. Martin, 'Charge transfer in high velocity C_N⁺ - He collisions' ICPEAC 2005 - Rosario, (Argentine) 2005

M. Chabot, F. Mezdari, G. Martinet, K. Wohrer-Béroff, S. Della Negra, P. Désesquelles, H. Hamrita, A. Le Padellec, L. Montagnon, S. Diaz-Tendero, M. Alcami, P.A. Hervieux and F. Martin, 'Fragmentation of small carbon clusters' ICPEAC 2005 Rosario, (Argentine) 2005

7.4.1.4. Communications orales, séminaires, thèse

P. Moretto-Capelle, 'Dépôt d'énergie et fragmentation dans les collisions ions-C₆₀ (domaine du keV)' IPN Lyon Janv 2002

A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu et A. Bordenave-Montesquieu, 'Mesure de la température et évolution du C₆₀^{q+}' GDR Agrégats (Paris, 2003)

P. Moretto-Capelle, 'Electron spectroscopy in collision : from C60 to biomolecules' KVI, Groningen, Pays-Bas, mars 2004

A. Rentenier, 'Fragmentation de la molécule C₆₀ par impact d'ions légers étudiée en multicorrélation. Sections efficaces, spectroscopie d'électron' these de l'universite Paul Sabatier Avril 2004

7.4.2. Publications de A. Le Padellec avant son arrivée dans l'équipe

7.4.2.1. Articles dans des revues avec comité de lecture

- [1] T. Nzeyimana, E.A. Naji, X. Urbain and A. Le Padellec, 'Merged beam study of the associative ionisation (C^+ , N^+ and O^+) + O^- ', *Eur. Phys. J. D*, 19, 315, (2002)
- [2] A. Le Padellec, G.F. Collins, H. Danared, A. Källberg, F. Hellberg, K. Andersson, D. Hanstorp and M. Larsson, "Relative cross sections for the Electron Impact Single Detachment on Li^- ", *J. Phys. B*, 35, 3669, (2002).
- [3] E.A. Naji, T. Nzeyimana, X. Urbain and A. Le Padellec, "Merged beam study of the associative ionisation O^-+D^+/O^++D^- and C^++D^- ", *J. Phys. B*, 35, 4325, (2002).
- [4] A. Al-Khalili, S. Rosen, H. Danared, A.M. Derkatch, A. Källberg, M. Larsson, A. Le Padellec, A. Neau, J. Semaniak, R. Thomas, M. af Ugglas, L. Vikor, W. Zong, W.J. van der Zande, X. Urbain, M.J. Jensen, R.C. Bilodeau, O. Heber, H.B. Pedersen, C.P. Safvan, L. Andersen, M. Lange, J. Levin, G. Gwinner, L. Knoll, M. Scheffel, D. Schwalm, R. Wester, D. Zajfman and A. Wolf, 'Absolute High-Resolution Rate Coefficients for Dissociative Recombination of Electrons with HD^+ : Comparison of Results from Three Heavy Ion Storage Rings', *Phys. Rev. A*, 68, 042702, (2003).
- [5] K. Fritioff, D. Hanstorp, J. Sandström, A. Ehlerding, M. Larsson, G.F. Collins, D.J. Pegg, H. Danared, A. Källberg and A. Le Padellec, "Electron-impact detachment of Cl^- ", *Phys. Rev. A*, 68, 012712, (2003).
- [6] K. Fritioff, J. Sandström, P. Andersson, D. Hanstorp, F. Hellberg, R. Thomas, W. Geppert, M. Larsson, F. Osterdahl, G.F. Collins, A. Le Padellec, D.J. Pegg, N.D. Gibson, H. Danared and A. Källberg, "Observation of an excited C_4^{2-} ion", *J. Phys. B*, 37, 2241, (2004).
- [7] G. Martinet, S. Diaz-Tendero, M. Chabot, K. Wohrer, S. Della Negra, F. Mezdari, H. Hamrita, P. Désesquelles, A. Le Padellec, D. Gardés, L. Lavergne, G. Lalu, X. Grave, J. F. Clavelin, P. A. Hervieux, M. Alcamí and F. Martin, «Fragmentation of highly excited small neutral carbon clusters», *Phys. Rev. Lett.*, 93(6), 063401, (2004).
- [8] E.M. Staicu-Casagrande, T. Nzeyimana, E.A. Naji, N. de Ruelle, B. Fabre, A. Le Padellec and X. Urbain, "Abstraction and insertion mechanisms in reactive collisions between H_2^+ or D_2^+ and O^- " *Eur. Phys. J. D*, 31(3), 469, (2004).

7.4.2.2. Articles dans des livres à comité de lecture

A. Le Padellec, "Studies of electron collisions with CN^+ , CN^- and HCN^+/HNC^+ " "Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons" Kluwer Academic / Plenum Publishers, Harbound, ISBN 0-306-47765-3, Août 2003, Editeur : Steven L. Guberman - p.109 –

A. Le Padellec, X. Urbain, T. Nzeyimana and E.A. Naji, "Merged beam studies of associative ionization" "Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons" Kluwer Academic / Plenum Publishers, Harbound, ISBN 0-306-47765-3, Août 2003, Editeur : Steven L. Guberman - p.343

A. Le Padellec, F. Rabilloud, D. Pegg, K. Andersson, D. Hanstorp, A. Neau, M. Larsson, F. Hellberg and R. Thomas, "Electron collisions with C_4^- : detachment process and resonant structure", "Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons" Kluwer Academic / Plenum Publishers, Harbound, ISBN 0-306-47765-3, Août 2003, Editeur : Steven L. Guberman - p.441-

7.4.2.3. Actes de congrès

A Le Padellec, X Urbain, T. Nzeyimana and E-A. Naji, "Etude de l'association ionisante en faisceaux confluents", "PAMO 2002 – JSM 2002" Bourges, (France) 01-03 Juillet 2002

E.M. Staicu-Casagrande, N. de Ruelle, A. Le Padellec, E-A. Naji, T. Nzeyimana and X. Urbain, "Merged-beam study of associative ionization in collisions of C^- with C^+ , N^+ and O^+ " "International Scientific Meeting – SBP", Ghent University, (Belgium) 27-28 May 2003

E.M. Staicu-Casagrande, N. de Ruelle, A. Le Padellec, E-A. Naji, T. Nzeyimana and X. Urbain, "Merged-beam study of associative ionization in collisions of C^- with C^+ , N^+ and O^+ ", "ICPEAC 2003 - XXIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions", Stockholm, (Suède) 23-29 July 2003

M.E. Staicu-Casagrande, T. Nzeyimana, E.-A. Naji, A. Le Padellec and X. Urbain, "Insertion and abstraction mechanisms in collisions of O^- with H_2^+ and CH^+ ", "ETR Summer School & Network Meeting", University College London, (Grande Bretagne) 01-05 Septembre 2003

F. Mezdari, G. Martinet, M. Chabot, K. Wohrer, S. Della Negra, H. Hamrita and A. Le Padellec, "Carbon clusters-atom collisions at intermediate velocity" "ECAMP VIII – The eighth European Conference on Atomic and Molecular Physics" Rennes (France) 6 - 10 Juillet 2004

G. Martinet, S. Diaz-Tendero, M. Chabot, K. Wohrer, S. Della Negra, F. Mezdari, H. Hamrita, P. Desquenelles, A. Le Padellec, D. Gardes, L. Lavergne, G. Lalu, X. Grave, J.F. Clavelin, P.A. Hervieux, A. Alcamí and F. Martin, "Fragmentation of small neutral carbon clusters", "ECAMP VIII – The eighth European Conference on Atomic and Molecular Physics" Rennes (France) 6 - 10 Juillet 2004

E.M. Staicu-Casagrande, T. Nzeyimana, E.A. Naji, A. Le Padellec and X. Urbain "Insertion and abstraction mechanisms in collisions of O^- with H_2^+ and CH^+ " "ECAMP VIII - The eighth European Conference on Atomic and Molecular Physics" Rennes (France) 6 - 10 Juillet 2004

8. Interactions Ion - Surface

8.1. Composition de l'équipe :

Responsable : Martine RICHARD-VIARD (CR)

Permanents :

Claude BENAZETH (PR)
 Pierre BENOIT-CATTIN (PR émérite)
 Pierre CAFARELLI (MCF)
 Martine RICHARD-VIARD (CR)

Doctorant :

M./Mme	Prénom	Nom	Financement	Arrivée	Départ
M.	Nicolas	NIEUWJAER		01/08/2001	31/07/2005

Visiteurs :

M./Mme	Prénom	Nom	Université	Financement	Arrivée	Départ
M.	Mohamed	BOUDJEMA	USTHB		1 mois fin 2002	
M.	Mohamed	BOUDJEMA	USTHB		1 mois début 2003	
M.	Jean-François	VEYAN	UTFSM Chili		1 mois en 2003	

Stagiaires :

M./Mme	Prénom	Nom	Université/Ecole	Niveau	Arrivée	Départ
M.	Pierre-Luc	GIRARD- LAURIAULT	Erasmus	Bac+1	2mois en 2002	
M.	Franck	MINIOTTI	UPS	Bac+4	01/05/02	30/07/02
M.	Aree	ALI (*)	UPS	Bac+5	01/05/03	30/07/03
M.	Alan	LONGER	UPS	Bac+4	01/02/04	01/07/04
M.	Stéphane	HEISER	UPS	Bac+4	09/05/05	24/06/05
M.	Vincent	RIGAU	ENSPS	Bac+3	01/07/05	31/07/05

(*) Aree ALI a amorcé une thèse co-encadrée par Nicolas LORENTE ; cette collaboration a été interrompue après qu'un avis favorable du Haut Fonctionnaire Défense du CNRS ait été invalidé par une décision du Haut Fonctionnaire Défense du MENRT.

8.2. Compte-rendu de l'activité scientifique du 01/01/02 au 31/07/05

L'équipe « Interactions Ions-surfaces » exploite un accélérateur linéaire d'ions (gamme 1 à 80 keV) couplé à une chambre de mesure en ultra-vide. Cette dernière contient un analyseur hémisphérique, un spectromètre de masse, un porte-échantillon permettant de positionner (5 degrés de liberté) la cible par rapport au faisceau et un spectromètre par temps de vol. Ce dernier, mobile dans le plan d'incidence, est muni d'un déflecteur électrostatique afin de compléter l'analyse en vitesse des particules diffusées/éjectées par celle de leur état de charge. Ces caractéristiques permettent:

- le contrôle de l'état de surface de l'échantillon
- les caractérisations chimique et cristallographique des surfaces à l'échelle de la monocouche atomique,
- l'étude des mécanismes de transfert de charge,
- les modifications de surfaces par implantation ionique ou par dépôt,
- l'analyse profilométrique (nature et concentration) en alternant érosion et caractérisation.

Cet outil expérimental permet d'envisager des thèmes de recherche fondamentaux ou appliqués. Les premiers ont pour objectif de proposer, confirmer et/ou valider des modèles relatifs aux interactions ions-surface (potentiel d'interaction, mécanismes d'excitation ou de transfert de charge, ...), les seconds peuvent être associés, via la caractérisation (composition chimique et structure) des toutes premières couches de surface, à l'élaboration, la compréhension et l'optimisation de procédés.

Les études effectuées dans les années précédentes (1996-2001) sur les halogénures alcalins ayant montré l'importance de la structure cristallographique de la surface sur les processus d'échange de charge, l'intérêt s'est porté sur les surfaces métalliques "structurées" et l'influence, sur le taux de transfert de charge, des paramètres de collision (vitesses parallèle et perpendiculaire du projectile, angle d'incidence et angle d'azimut) ou de l'adsorption contrôlée d'oxygène (cf **8.2.1**)

Indépendamment du système étudié, l'interprétation des phénomènes qui ont été observés repose sur la simulation des trajectoires de l'ion incident et des atomes de la cible mis en mouvement. Pour cela nous utilisons le code MARLOWE. Après les quelques développements que nous avons réalisés, ce programme permet de reproduire les conditions expérimentales (faisceau d'ions, cible, détecteurs). Il est basé sur l'approximation des collisions binaires et n'utilise donc pas un potentiel à N-corps pour traduire l'interaction entre le projectile et l'ensemble des atomes de la cible. Depuis la collaboration avec « l'équipe Théorie » du laboratoire, nous pouvons justifier quantitativement les paramètres du potentiel de paires répulsif utilisé par MARLOWE (cf. calculs ab-initio réalisés avec le code DACAPO). La forme complète du potentiel d'interaction ressenti par l'ion incident au-dessus de la surface a été utilisée dans un code de dynamique moléculaire; ce dernier a été développé pour justifier clairement l'utilisation du code MARLOWE dans le cas envisagé et a priori très défavorable: la diffusion d'ions incidents sous angles d'incidence et/ou d'émergence rasants.

Récemment une collaboration vient d'être engagée avec le Laboratoire de Génie Électrique de Toulouse ; elle nous permet de développer, pour l'instant, une activité de caractérisation de surface, activité pour laquelle notre dispositif est particulièrement adapté (cf.**8.2.2**).

En parallèle, nous avons entrepris, dans le cadre d'une collaboration/fusion entre notre équipe et l'équipe « Spectrométrie d'électrons dans les collisions » du LCAR, une série de réunions informelles. Nous avons commencé à caractériser, pour le compte de cette équipe et dans un but exploratoire, un dépôt de molécules d'intérêt biologique sur un substrat d'or.

De manière régulière, nous accueillons, sur notre dispositif expérimental, des chercheurs du Laboratoire Interactions Rayonnement-Matière de l'USTHB (Algérie). Actuellement leur centre d'intérêt est l'effet de la charge image sur les coefficients de réflexion (cf 8.2.3).

8.2.1. Étude des transferts de charge sur des surfaces nanostructurées

La mise en évidence, reportée précédemment (rapport d'activité 1998-2001), du rôle important joué par la géométrie de la surface (NaCl) sur les processus d'échange de charge a porté notre intérêt sur l'étude de monocristaux présentant des reconstructions de surface particulières. Du point de vue de l'élaboration, les résultats de Brune et al., Nature 394, (1998) permettent d'envisager la fabrication de réseaux nanostructurés sur des surfaces. De plus, la connaissance des propriétés structurales et électroniques de matériaux nanostructurés autoorganisés est importante non seulement sur le plan fondamental mais aussi sur le plan technologique, par exemple en microélectronique (miniaturisation ultime, 'gravure' par auto-organisation...), en catalyse (composés à base d'argent utilisés dans les réactions d'époxydation de l'éthylène, d'oxydation partielle du méthanol). Les surfaces 'prototypes' que nous avons étudiées sont les surfaces Ag(110) et Cu(110). Elles se présentent sous forme de rangées d'atomes métalliques espacées entre elles de 4.08 et 3.64 Å respectivement. Ces études s'inscrivent dans le travail de thèse de Nicolas Nieuwjaer.

8.2.1.a. Echange de charge au cours de l'interaction de D^+ , Li^+ , Na^+ , F^+ /Ag(110) ou Cu(110) [réf.1]

L'étape préliminaire consiste à «nettoyer» l'échantillon en alternant des cycles de pulvérisation à incidence rasante (4 keV Ar+) et de recuit (700K). La qualité de la surface est vérifiée en relevant le spectre en temps de vol des particules de recul (figure 1). La procédure consiste à obtenir l'absence d'atomes de recul autres que ceux du substrat et à contrôler la largeur des distributions.

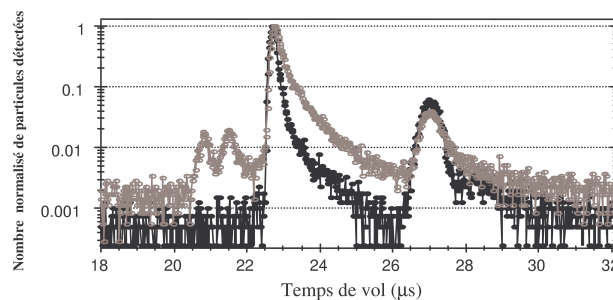


Figure 1 : Spectres en temps de vol obtenus lors de la diffusion d'ions Ar^+ d'énergie 4 keV sur une surface Ag(110) (sale en gris, propre en noir). L'angle d'incidence est de 15° et l'angle de diffusion de 30°

L'étape suivante permet d'orienter l'échantillon. Pour cela les distributions d'intensité des particules diffusées ou éjectées en fonction de l'azimut sont relevées. Leur comparaison avec celles calculées par MARLOWE donnent sans aucune ambiguïté les différentes directions cristallographiques (figure 2).

Le nettoyage puis la caractérisation de surface ayant été effectués, les fractions de charge positives et négatives sont mesurées.

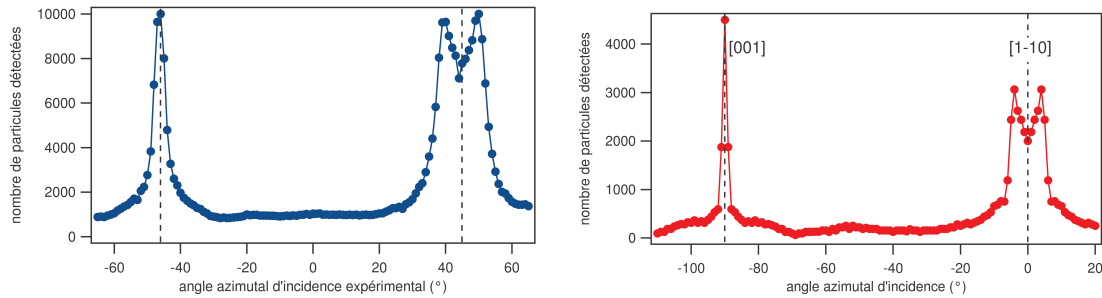


Figure 2 : Nombre de particules diffusées en fonction de l'angle azimutal d'incidence lors de la diffusion d'ions Ar+ de 4keV sur Ag(110) pour des angles d'incidence et de sortie de 15° par rapport à la surface (à gauche expérience, à droite simulation)

Ion D+: Dans cette étude, l'objectif était de tester les modèles théoriques à partir des variations des fractions de charge en fonction de l'azimut. Malheureusement nos mesures ont montré que les fractions positives et négatives sont inférieures à 0.5% pour des projectiles de 4 keV et augmentent légèrement avec l'énergie incidente. Ces faibles taux sont dans la barre d'erreur expérimentale et ne sont restés indépendamment de l'azimut. Les mesures s'étant également révélées extrêmement sensibles à la pollution de la surface, l'étude expérimentale sur cet ion qui présentait des avantages certains (petite taille et structure électronique simple) a été arrêtée.

Ions Li⁺, F⁺, Na⁺

Après un premier semestre 2002 marqué par des problèmes expérimentaux au niveau du système de détection, de nombreuses mesures de fractions de charge ont été faites sur Cu (110). Les études sur Ag (110) ont été moins nombreuses à cause de la difficulté à préparer les surfaces.

Nous avons mesuré les fractions de charge d'ions négatifs (F⁻) et positifs (Na⁺, Li⁺) produites par des diffusions rasantes sur cette surface. Une large gamme d'énergies incidentes et d'angles de diffusion a été explorée de manière à analyser les effets des vitesses parallèle et perpendiculaire des projectiles incidents sur le processus de transfert de charge. Deux comportements caractéristiques sont observés expérimentalement pour la dépendance en fonction de la vitesse parallèle des fractions de charge positives (cas de la diffusion des ions Na⁺ et Li⁺) ou négatives (en effet, dans le cas des ions F⁺, à l'approche de la surface, il y a une neutralisation très efficace des projectiles et une seconde capture électronique est ensuite possible). Ces comportements, ainsi que l'effet de la vitesse perpendiculaire des projectiles sont interprétés qualitativement dans le cadre du modèle de la distance de gel, les effets de la vitesse parallèle étant pris en compte par le biais du concept de sphère de Fermi décalée. Ces résultats sont présentés dans l'article de N. Nieuwjaer et al. [NIM B 230 (2005) 317-322].

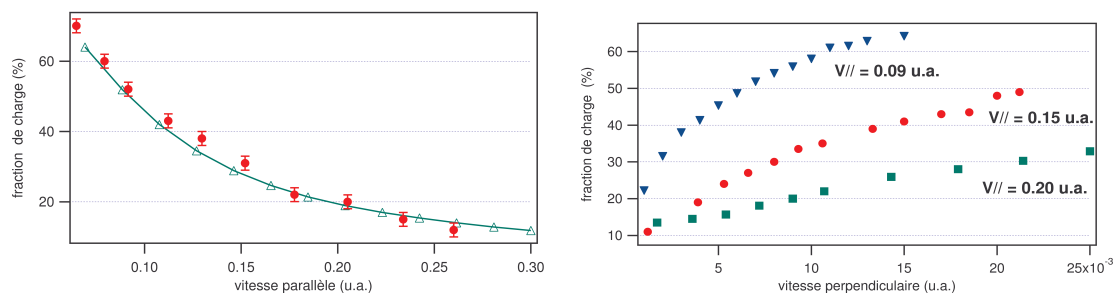


Figure 3 : Variations des fractions de charge négative lors de la diffusion d'ion F⁺ sur Cu(110): à gauche en fonction de la vitesse parallèle, vitesse perpendiculaire fixée à 7 10⁻³ u.a (modèle en trait continu), à droite en fonction de la vitesse perpendiculaire pour différentes vitesses parallèles.

Pour tenter de mettre en évidence une éventuelle influence des caractéristiques des trajectoires suivies par les projectiles, nous avons étudié expérimentalement les variations des fractions de charge en fonction de l'angle azimutal d'incidence, dans des conditions d'incidence rasante. Dans différents cas, nous avons observé des variations azimutales significatives des fractions de charge autour des directions [001] et [110] (figure 4). Nous avons également observé une dépendance de ces variations azimutales avec l'énergie initiale des projectiles. On peut tenter de relier les variations azimutales observées expérimentalement autour des directions [110] et [001] des surfaces Ag(110) et Cu(110) aux caractéristiques des trajectoires suivies par les projectiles. En effet, pour les deux directions considérées et pour des conditions de diffusion sous incidence rasante, les projectiles s'approchent davantage de la surface, et peuvent passer en-dessous de la première couche lorsqu'ils sont guidés par les "sillons" présents dans ces directions, alors qu'à azimut quelconque, la réflexion se fait au-dessus de la première couche (simulations MARLOWE). Les projectiles guidés par les sillons sont susceptibles d'être plus sensibles aux «détails» de l'interaction projectile surface (voir paragraphe suivant). Nous n'avons cependant pas dégagé d'explication précise concernant l'existence d'un tel lien, et il est par exemple difficile d'interpréter les changements observés pour les largeurs des pics associés aux fractions de charge dans les directions [110] et [001] lorsque l'on modifie l'énergie des projectiles.

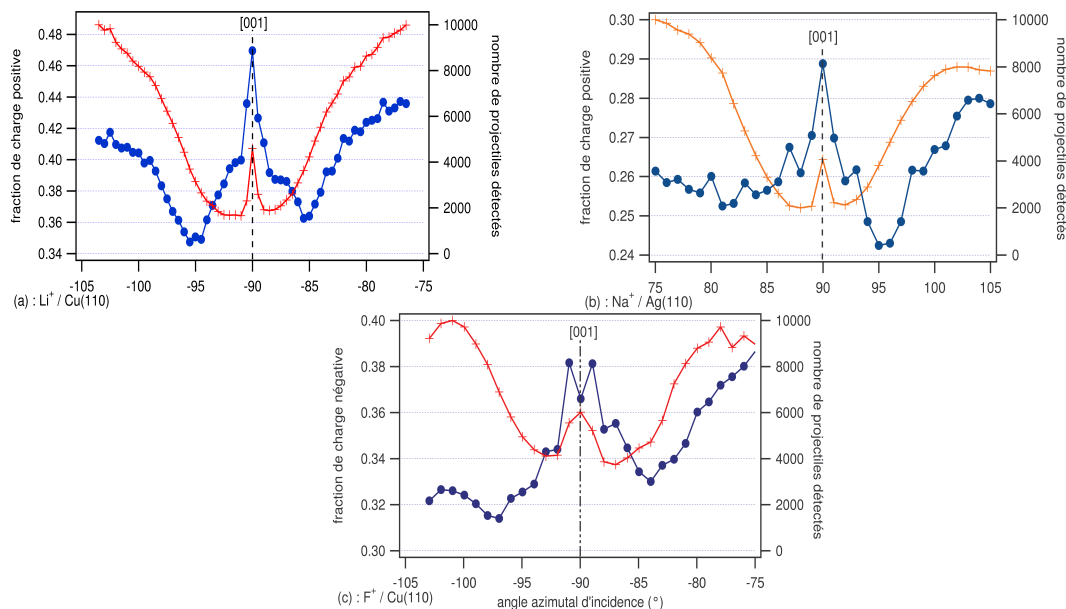


Figure 4 : Variations en fonction de l'angle azimutal d'incidence du nombre de particules détectées (+) et de la fraction de charge (\perp) positive lors de la diffusion d'ions Li^+ sur la surface Cu(110) (a), d'ions Na^+ sur la surface Ag(110) (b) et négative lors de la diffusion d'ions F^+ sur la surface Cu(110) (c). L'énergie initiale des projectiles est de 1.25 keV, les angles d'incidence et de sortie sont de 3° par rapport à la surface.

8.2.1.b. Modélisation de la diffusion de l'hydrogène atomique sur Ag (110) [réf.2]

En parallèle à l'étude expérimentale du système D+/Ag(110), l'étude théorique du système H/Ag(110) a été entreprise. L'objectif était double:

- acquérir une nouvelle compétence dans l'utilisation d'un code de calcul ab-initio de structure électronique d'un système complexe.
- élaborer, à l'aide des informations délivrées par ce code, un modèle expliquant les valeurs et variations des fractions de charge mesurées.

La maîtrise du code a été grandement facilitée par l'aide précieuse de Nicolas Lorente (Équipe "Théorie" du LCAR). Ce dernier nous a fourni, en outre, l'accès indispensable à des

ressources informatiques importantes (CALMIP et CINES). Une étude systématique de calcul de structure électronique du système H/Ag(110) a été entreprise en fonction de la position de l'atome d'hydrogène au-dessus de la surface. Comme le code utilisé simule un système périodique (ce qui permet de modéliser des systèmes étendus et des surfaces solides), les positions envisagées sont restées confinées dans une cellule unité. La cellule unité est une «boîte» contenant quelques atomes d'Ag surmontés par un atome d'hydrogène de coordonnées x_H, y_H, z_H . Les différentes positions ont été sélectionnées en fonction de la symétrie du système et de la résolution recherchée (maillage inhomogène). Bien entendu, la dimension de la cellule a été contrôlée afin qu'aucun artefact (influence d'une cellule sur l'autre) ne vienne fausser les résultats.

Le calcul a donné plusieurs résultats intéressants: le calcul ab-initio du potentiel, le calcul direct de la force $f(x,y,z)$ ressentie par un atome d'hydrogène au voisinage de la surface Ag(110) et la densité d'états projetée du système H/Ag(110) sur l'état 1s de l'atome d'hydrogène. Cette dernière quantité fournit une description qualitative simple de la structure électronique du système atome-surface. Cette densité d'états projetée est construite en utilisant les fonctions d'onde de Kohn et Sham comme de vraies fonctions d'onde. La densité d'états projetée permet d'obtenir des informations sur l'aptitude d'un état donné (l'état sur lequel on projette) à être un état propre du système.

Malgré l'impossibilité expérimentale de mettre en évidence des variations de la fraction de charge en azimut, une partie des résultats précédents a été utilisée pour retrouver les variations en azimut du nombre (non résolu en charge) de particules diffusées. Pour cela nous avons développé un code de simulation de dynamique moléculaire exploitant la force exercée sur l'atome d'hydrogène et obtenue seulement en quelques points de la cellule unité (x_nH, y_nH, z_nH). La technique consiste à calculer de proche en proche (incrément de temps Δt) la trajectoire $r(t)$ de l'atome en utilisant une force interpolée à l'instant t . Cette force est calculée à partir de la position équivalente de l'atome dans la cellule unité et des forces déterminées précédemment. Les premiers résultats, obtenus autour de la direction [110], sont en assez bon accord avec les mesures expérimentales et avec ceux obtenus par le code MARLOWE de simulation de trajectoires basé sur l'approximation des collisions binaires avec un potentiel de paires. Cette étude a fait l'objet d'une publication (ref 2).

8.2.1.c. Dépôt d'oxygène sur Ag (110) et Cu (110)

Des travaux de microscopie par effet tunnel (STM) sur Ag [Zambelli et al., Phys. Rev. B 1998, 58] et sur Cu [Leisble et al. Surf. Sci 1994, 317] ont montré que l'adsorption d'oxygène sur ces matériaux conduit à une reconstruction sous forme de chaînes métal-oxygène («added-row reconstruction») alignées le long de l'axe [001]. Dans le cas du cuivre la reconstruction est toujours de type (2x1), alors que dans le cas de l'argent, suivant la quantité d'oxygène déposée la reconstruction varie de (8x1) à (2x1).

Nous avons réalisé de nombreuses mesures sur le cuivre oxydé. L'oxygène est introduit grâce à une ligne d'introduction de gaz avec microvanne réglable. L'identification des sites d'adsorption et des structures se fait par l'analyse du nombre de particules diffusées en faisant varier l'angle azimutal. L'évolution des profils de diffusion au cours de l'oxydation permet de contrôler la reconstruction et de la corrélérer à l'évolution de la fraction de charge. La structure (2x1), identifiée sans ambiguïté par le profil de diffusion (figure 5) est obtenue après une oxydation de faible exposition (environ 5 Langmuir). Le chauffage ultérieur de l'échantillon pendant plusieurs heures, suivi des procédures habituelles de nettoyage (pulvérisation et recuit) permet de revenir à une surface Cu(110) propre.

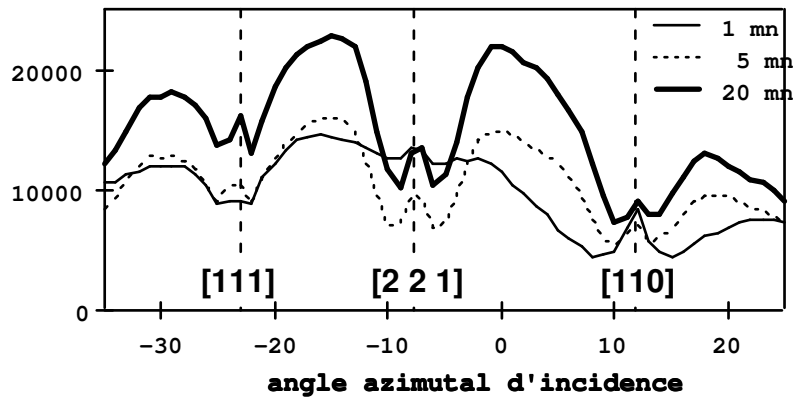


Figure 5 : Nombre de projectiles diffusés sous un angle de 6° pour des ions lithium de 4 keV interagissant avec Cu(110) sous une incidence rasante de 3° pour différentes durées d'oxydation sous 4.10^{-9} mbar.

L'oxydation de l'argent pose plus de problème. Au moins 20000L sont nécessaires pour former la structure (2x1) et la reconstruction peut être compromise par la présence de carbone résiduel. Seules quelques mesures ont pu être effectuées.

L'évolution des fractions de charge au cours de l'exposition à l'oxygène, ainsi que les effets cinématiques observés, peuvent être en partie expliqués par l'augmentation du travail de sortie, qui est un effet "global". Dans le cadre du modèle de la distance de gel, les résultats obtenus pour l'influence des vitesses parallèle et perpendiculaire des projectiles sont cependant en moins bon accord avec les valeurs expérimentales dans le cas des surfaces exposées à l'oxygène que dans le cas des surfaces propres, ce qui suggère l'influence d'effets "locaux" liés à la présence d'adsorbats sur les surfaces.

8.2.2 Analyse de couches minces déposées

Cette collaboration a débuté en mars 2005 avec l'équipe «Matériaux et procédés plasma» du Laboratoire de Génie Électrique de Toulouse. Ce groupe, dirigé par Patrice Raynaud, s'intéresse au développement, à la maîtrise et à la modélisation des procédés «plasmas froids» à basse pression et pression atmosphérique. Cette étude a pour but l'élaboration de couches minces ou le traitement de surface et utilise des analyses, optiques et physico-chimiques du gaz et du solide. Actuellement l'intérêt se porte sur les dépôts plasmas de films organosiliciés avec l'étude du rôle de l'hydrogène dans les propriétés des couches. L'objectif général du sujet est d'avoir la meilleure compréhension possible et par conséquent la maîtrise des mécanismes permettant le passage de la phase gaz (état plasma) à la phase solide (couche mince déposée sur le substrat). Le choix des monomères est motivé par les propriétés des films obtenus qui peuvent trouver des applications dans de nombreux domaines (électronique, métallurgie, optique, ...) mais aussi pour des raisons académiques puisque les liaisons chimiques qui existent dans le précurseur de départ (Si-O, Si-C, C-O, C-H) se retrouvent dans la plupart des procédés plasma. Il apparaît que les propriétés des films élaborés par plasma dépendent notablement de la quantité d'hydrogène dans les couches superficielles ou profondes du film. La caractérisation de cet hydrogène en surface et en profondeur est donc indispensable. Notre technique de caractérisation des surfaces couplée à des cycles d'érosion répond en tout point à leurs besoins. Actuellement des tests préliminaires sont en cours de manière à définir le protocole de caractérisation optimum (présentation et traitement des échantillons, choix du projectile, de l'énergie, des conditions d'incidence, déconvolution des spectres,

8.2.3 Collaboration avec l'USTHB

Effet du potentiel image sur le coefficient de réflexion spéculaire d'ions alcalins de faible énergie (4 keV) diffusés par une surface de nickel polycristallin[réf.3]

Au voisinage d'une surface métallique, les particules chargées sont soumises à la force image. Cette force peut être traduite, en première approximation, comme une interaction localisée dans un plan situé à quelques unités atomiques de la surface. Son effet se traduit par une déviation des trajectoires ce qui conduit à des angles d'incidence ou d'émergence des particules diffusées différents de leurs valeurs nominales. Comme conséquence directe, un désaccord important est attendu, dans le cas d'angles d'incidence faibles, entre les valeurs du coefficient de réflexion spéculaire calculées par un code de simulation (où cet effet n'est pas pris en compte) et celles observées expérimentalement. L'étude de ce désaccord doit donc permettre, via une modélisation adéquate, de tirer quelques caractéristiques sur le phénomène d'échange de charge et sur le potentiel image entre l'ion incident et la surface métallique. Dans les études entreprises, les variations expérimentales du coefficient de réflexion spéculaire associé au système Li+(ou Na+)/nickel amorphe ont été relevées puis analysées. Les variations ont été confrontées à un modèle dont les paramètres sont la valeur du potentiel image et la fraction de charge sur la voie d'entrée. Les valeurs optimisées sont en très bon accord avec les calculs théoriques.

Effet du potentiel image sur le coefficient de réflexion spéculaire d'ions He+ diffusés sur du silicium amorphe [réf.4]

A cause de la polarisation électronique à l'intérieur du solide provoquée par la présence d'une particule chargée près de la surface, le projectile est soumis aussi à une force de « frottement » parallèle à la surface. L'ajout de cette force, ignorée dans l'étude précédente, a donné un ajustement plus satisfaisant entre les spectres calculés et les spectres expérimentaux (combinaison He+/a :Si). Les comparaisons ont clairement mis en évidence la différence entre quelques modèles approximant la fonction diélectrique de surface.

Rôle de la canalisation sur la dissociation d'ions moléculaires diffusés sur des surfaces à symétrie réduite

Dans un but de prospective, les premières mesures expérimentales de profil de diffusion en fonction de l'angle azimutal d'incidence ont eu lieu en décembre 2002. Des ions D^+ , D_2^+ et D_3^+ d'énergie variable de 1,5 à 12 keV sont diffusés, sous incidence rasante, sur une surface de Cu(110). La canalisation des ions entre des rangées d'atomes pour une incidence le long de la direction (110) multiplie le nombre de collisions avec les atomes de la surface, entraîne une dispersion du faisceau incident et donc une diminution du nombre de particules détectées en diffusion spéculaire. En revanche, pour un angle aléatoire, le projectile subit moins de collisions et sort avec un angle correspondant à la diffusion spéculaire. L'analyse détaillée des profils de diffusion doit permettre de caractériser les trajectoires suivies par les projectiles. On s'attend à ce que celles-ci soient différentes suivant qu'il y ait dissociation ou non lors de la diffusion.

8.2.4 Conclusions et perspectives

L'équipe "Interactions ions-surface" dispose d'un outil performant de recherche et d'analyse. Les thématiques explorées ces 12 dernières années ont exploité les différentes possibilités de ce montage: étude des transferts de charges, modifications des surfaces par implantation et/ou irradiation d'ions, analyse chimique et cristallographique des toutes premières couches de surface. Les travaux réalisés ont fait parfois l'objet de collaborations directes avec le monde industriel. Actuellement une collaboration avec le laboratoire de génie électrique de Toulouse est en cours et devrait, à terme, nous permettre de disposer de surfaces "technologiques" dont l'étude conduira à des résultats originaux.

Actuellement, l'équipe comprend quatre personnes mais P. Benoit-Cattin (Professeur émérite) ne travaille qu'à temps partiel et C. Bénazeth (Professeur) fera valoir ses droits à la retraite en octobre 2006. Etant donnée la conjoncture actuelle, il devient donc indispensable de réaliser un rapprochement étroit avec une autre équipe du laboratoire. C'est avec l'équipe "**Spectrométrie d'électrons dans les collisions**" que ceci paraît le plus judicieux (accélérateurs d'ions dans les deux équipes, proximité géographique, thématique complémentaire, affinités humaines.....) et des collaborations en ce sens ont été entreprises: des expériences exploratoires ont été réalisées sur la diffusion d'ion Ar (4keV) sur une surface d'or partiellement recouverte d'uracil. Elles ont montré la nécessité de préparer in situ le dépôt, et de chauffer très légèrement l'échantillon afin d'éviter toute pollution dans l'enceinte.

Dans les prochains mois, l'équipe "Interactions ions-surface" va principalement compléter les résultats expérimentaux contenus dans la thèse soutenue récemment par Nicolas Nieuwjaer et poursuivre l'étude entreprise avec le LGE. La collaboration avec l'USTHB est maintenue (un séjour de longue durée de M. Boudjema a été demandé). Le séjour post-doctoral de Nicolas Nieuwjaer dans l'unité de physico-chimie et de physique des matériaux de l'Université de Louvain La Neuve (Belgique) devrait permettre d'autres ouvertures.

8.3. Collaboration

Collaboration avec le groupe "Interactions Ions-Surfaces Solides" du Laboratoire "Interactions Rayonnement-Matière" de l'Université USTHB à Alger.

Collaboration avec le groupe "Matériaux et procédés plasma" du LGE à Toulouse.

8.4. Les publications

8.4.1. Revues à comité de lecture

1. Charge transfer in grazing scattering on clean and oxygen covered Cu(110) surfaces: velocity effects, N. Nieuwjaer, C. Bénazeth, P. Benoit-Cattin, P. Cafarelli, M. Richard-Viard. NIM B 230 (2005) 317-322.
2. Simulations of the azimuthal distribution of low energy H atoms scattered off Ag(110) at grazing incidence : DFT many-body versus model pair potentials, P. Cafarelli, M. Richard-Viard, C. Bénazeth, N. Nieuwjaer, N. Lorente, NIM B 203 (2003) 211-217.
3. Image potential effect on the specular reflection coefficient of alkali ions scattered from a nickel surface at low energy, R. Zemith, M. Boudjema, C. Bénazeth, Y. Boudouma, A.C Chami NIM B 193 (2002) 396-402.

4. Specular reflection model study of the image effect in He⁺/a:Si scattering at low energy A. Hidouche, A.C. Chami, Y. Boudouma, M. Boudjema, C. Bénazeth NIM B 230 (2005) 178-184.

8.4.2. Communications à des congrès

1. Simulations of the azimuthal distribution of low energy H atoms scattered off Ag(110) at grazing incidence : DFT many-body versus model pair potentials, P. Cafarelli, M. Richard-Viard, C. Bénazeth, N. Nieuwjaer, N. Lorente, IISC 14, Ameland, Pays-Bas, 8-13 septembre 2002.
2. Charge transfer in grazing scattering on clean and oxygen covered Cu(110) surfaces, communication orale, N. Nieuwjaer, C. Bénazeth, P. Benoit-Cattin, P. Cafarelli, M. Richard-Viard, ICACS 21, Genova, Italie, 4-9 juillet 2004

9. Théorie des processus dynamiques dans les systèmes moléculaires

9.1. Composition de l'équipe :

Responsable :

J. A. Beswick (avant septembre 2003), C. Meier et N. Lorente (depuis octobre 2003)

Permanents :

J. A. Beswick (PRCE-UPS)
 C. Meier (PR2-UPS)
 N. Lorente (MCF)
 B. Lepetit (CR1-CNRS)
 D. Lemoine (CR1-CNRS)

ATER, post-docs :

Prénom	Nom	Financement	Arrivée	Départ
Etienne	Gindensperger	ATER	sep 2002	sep 2003
Arnaud	Dupays	ATER	sep 2004	sep 2005
Riccardo	Ruralli	Post-doc	janv.2004	déc 2005

Doctorants :

Prénom	Nom	Financement	Arrivée	Départ
Etienne	Gindensperger	bourse MEN	sep 2000	juillet 2003
Arnaud	Dupays	bourse MEN	sep 2001	août 2004

Visiteurs :

Prénom	Nom	Université	Financement	Arrivée	Départ
Dimitar	Bakalov	Sofia	NATO	1 mai 2002	31 mai 2002
Bengt	Lundquist	Chalmers	PR invité	15 nov 2002	15 dec 2003
Mads	Brandbyge	Lyngby	poste rouge	1 oct 2002	15 dec 2002
Silvana	Radescu	Laguna	ACI jeune ch.	1 fev 2003	15 août 2003
Thomas	Lohmüller	Würzburg	PROCOPE	mars 2003	
Dimitar	Bakalov	Sofia	NATO	juin 2003	
Stefanie	Gräfe	Würzburg	PROCOPE	24 nov 2003	5 dec 2003
Pablo	Ordejón	Barcelona	UPS	nov 2004	
Alexei	Buchachenko	Moscou	UPS	1 mars 2004	30 avril 2004
Octavio	Roncero	CSIC Madrid	DREI CNRS	1 avril 2004	8 avril 2004
Dimitar	Bakalov	Sofia	DREI CNRS	1 juin 2004	30 juin 2004
Eduardo	Hernandez	Barcelona	poste rouge	1 mai 2004	31 juillet 2004
Philip	Marquentand	Würzburg	PROCOPE	18 oct 2004	28 oct 2004
Álvaro	Valdés	CSIC Madrid	CSIC	1 mars 2005	30 juillet 2005
Timur	Tscherbul	Moscou	INTAS	1 mars 2005	30 mai 2005
Dimitar	Bakalov	Sofia	DREI CNRS	1 juin 2005	30 juin 2005
Susana	Gomez-Carrasco	CSIC Madrid	DREI CNRS	1 juillet 2005	30 juillet 2005

Stagiaires (maîtrise, master, DEA, Ecoles, autres) :

Prénom	Nom	Université/Ecole	Niveau	Arrivée	Départ
Thomas	Guillon	UPS	Maîtrise	mai 2002	juin 2002
P.	Castany	UPS	Maîtrise	mai 2002	juin 2002
David	Bonhommeau	UPS	Maîtrise	mai 2002	juin 2002
Karim	Guez-Guez	UPS	Maîtrise	mai 2003	juin 2003
Rémi	Vincent	UPS	DEA	avril 2003	juin 2003

Thomas	Guillon	UPS	DEA	avril 2003	juin 2003
Alexandre	Bekstein	UPS	Maîtrise	mai 2004	juin 2004
Clément	Touya	UPS	Maîtrise	mai 2004	juin 2004
Florian	Wippel	Erasmus Vienne	Master 2	mars 2005	juin 2005
Sergio	Monturet	UPS	Master 2	mars 2005	juin 2005
A.	Poissier	UPS	Maîtrise	mai 2005	juin 2005
Nicolas	Estrampes	UPS	Master 1	mai 2005	juin 2005

9.2. Compte-rendu de l'activité scientifique du 01/01/2002 au 31/07/05

Introduction

Les travaux de l'équipe pendant la période 2002-2005 concernent essentiellement l'étude théorique de la dynamique d'atomes ou de molécules en phase gazeuse ou sur des surfaces, en interaction ou non avec des photons ou une pointe STM. Les méthodes utilisées sont celles de la mécanique quantique ou mixtes quantique-classique.

Plusieurs sujets de recherche ont été initiés dans cette période. En collaboration avec des groupes expérimentaux du LCAR, des études sur la dynamique femtoseconde ont été étendues à des petits agrégats (avec les équipes agrégats et femto), et des études sur la dynamique entre atomes exotiques ont été initiées (avec C. Rizzo). N. Lorente a obtenu en septembre 2001 une ACI jeune chercheur pour trois ans. Elle porte sur l'étude théorique des transferts d'énergie et de charge entre particules et surfaces solides. L'objectif est de comprendre la manipulation d'objets de taille atomique sur des surfaces solides pour traiter les problèmes liés au développement de nanostructures ayant des propriétés électroniques, chimiques et structurales bien définies. Cette recherche se place dans le cadre général de la manipulation par STM. Parallèlement, des études de collision ion-surface métallique sont conduites en collaboration avec l'équipe expérimentale ion-surface du laboratoire.

Avec l'arrivée de D. Lemoine au 1^{er} mai 2003, les activités de recherche portent également sur la dynamique réactionnelle gaz-surface. De plus, M.A. Bouchène qui nous a rejoint au 1^{er} août 2005, développe des études de dynamique d'atomes et d'agrégats soumis à des champs intenses, et de propagation d'impulsions intenses.

9.2.1. Dynamique quantique de photodissociation de complexes de van der Waals (B. Lepetit, D. Lemoine)

La dynamique de photodissociation de complexes de van der Waals est plus ou moins rapide selon la nature de l'état excité. Le processus $\text{Ar}\dots\text{HBr} \rightarrow \text{ArBr}+\text{H}$ ou $\text{Ar}+\text{Br}+\text{H}$, prototype d'un mécanisme d'abstraction : $\text{A}\dots\text{B}\dots\text{C} \rightarrow \text{AC}+\text{B}$, est représentatif d'une dynamique rapide. Dans le système des coordonnées de Jacobi décrivant le mieux l'abstraction, la singularité radiale en $R=0$ est résolue analytiquement par une méthode de transformée de Bessel. Les calculs de paquet d'ondes ont mis en évidence des effets d'interférence quantique que nous avons interprétés. La prédissociation de l'isomère perpendiculaire du complexe $\text{Ar}\dots\text{I}_2$ est représentative d'une dynamique lente avec compétition entre prédissociation électronique et vibrationnelle. Les calculs de paquet d'ondes sur 5 surfaces électroniques couplées ont permis d'interpréter les oscillations observées dans le rapport des taux de prédissociations vibrationnelle et électronique, comme le résultat de la relaxation intramoléculaire vibrationnelle.

Ces calculs utilisent des surfaces semi-empiriques DIM dont la précision est mal connue. Nous avons profité de la venue de A.A. Buchachenko en tant que professeur invité, puis de Timur Tscherboul en tant que INTAS young scientist, pour réaliser des calculs ab-initio sur ce système, avec l'aide de Christian Teichteil et Thierry Leininger du LPQ. Néanmoins, du fait de leur lourdeur et de leur complexité, ces calculs n'ont pas pu être menés encore à terme.

Dans un régime de dynamique lente, le calcul en paquet d'ondes des résonances devient lourd. Une méthode plus élégante utilise une approche itérative indépendante du temps et transforme la recherche des états résonants en un problème de diagonalisation d'une matrice complexe symétrique via un potentiel optique, qui peut être résolu efficacement par l'algorithme de Lanczos. Ce type de méthode a été testé sur le système HeI_2 grâce à la venue de Á. Valdés, étudiant au CSIC à Madrid, qui avait réalisé des calculs ab-initio de surfaces de potentiel de ce système. Ces surfaces récentes montrent l'existence d'un isomère colinéaire en plus de l'isomère perpendiculaire déjà connu. Les expériences de photodissociation ont mis en évidence des résonances étroites qui ont pu être retrouvées par nos calculs.

Projets :

- extension du formalisme de transformée de Bessel à des ondes partielles non nulles.
- reprendre des calculs plus précis sur ArI_2 utilisant des surfaces plus précises (ab-initio) et l'approche itérative de Lanczos pour caractériser les états résonants et les spectres d'absorption.

9.2.2. Dynamique des atomes exotiques (A. Dupays, B. Lepetit, J. A. Beswick)

Cette activité s'inscrit dans le cadre d'un axe prioritaire du CNRS, à l'interface entre la physique moléculaire et la physique des interactions fondamentales. Récemment, C. Rizzo (LCAR) et D. Bakalov (Sofia) ont proposé une nouvelle expérience laser de mesure de la structure hyperfine de l'hydrogène muonique. La faisabilité de cette expérience dépend de façon critique de la dépendance en énergie du taux de transfert d'un muon entre atomes d'hydrogène et d'oxygène. De ce fait, notre travail se situe en amont de cette expérience lourde et délicate, et consiste à caractériser les propriétés dynamiques de ce transfert. Les travaux ont démarré à l'automne 2001 avec l'arrivée de A. Dupays. Ils sont réalisés en coopération avec D. Bakalov (Bulgarie) dans le cadre d'un contrat OTAN et d'une coopération financée par la DREI CNRS. Les coordonnées hypersphériques-elliptiques ont été utilisées à la fois pour un moment angulaire nul et non nul. Le problème est paradoxalement d'un point de vue théorique un problème de collision ultra-froide, et l'on retrouve les lois de seuil de Wigner.

Les taux de transfert obtenus ont pu être comparés aux résultats expérimentaux, non seulement pour l'oxygène, mais aussi pour le carbone, l'azote et le néon. L'accord avec les résultats expérimentaux est bien supérieur à tous les modèles produits à ce jour. En particulier, des effets isotopiques importants, obtenus en substituant un deuteron au proton, ont pu être reproduits et expliqués. Ceci nous a conduit à écrire un communiqué de presse avec la DIST du CNRS. Un désaccord subsiste néanmoins pour l'oxygène aux énergies hyperthermiques, et il est important de mieux comprendre ce point car il est crucial pour la faisabilité de l'expérience de mesure de structure hyperfine.

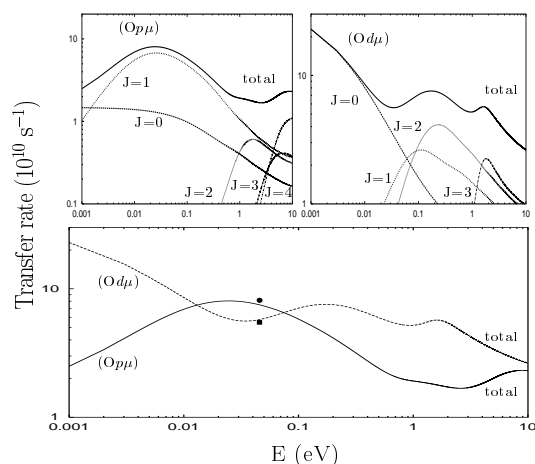
Dans le cadre de la coopération avec l'IRNE à Sofia, nous avons aussi étudié la désexcitation collisionnelle de l'hélium antiprotonique métastable dans l'hélium normal, et montré que ce processus est peu probable, ce qui, suivant les cas, correspond bien ou mal aux résultats expérimentaux.

Projets :

Les modèles sur les atomes muoniques devraient être poursuivis, en particulier pour résoudre la divergence expérience-théorie cruciale pour l'oxygène aux énergies hyperthermiques. Les enrichissements possibles du modèle sont :

- prise en compte du caractère moléculaire de l'hydrogène et des modes de vibration-rotation. En effet, le quantum d'énergie vibrationnelle de l'oxygène est quasi égal à l'écart de structure hyperfine de l'oxygène muonique, on peut donc espérer des effets de résonance significatifs.
- prise en compte de la structure hyperfine de l'hydrogène muonique, l'écart de structure hyperfine étant du même ordre de grandeur que l'énergie de collision

- prise en compte des effets d'écran des électrons du système.



Taux de transfert $O + p\mu \rightarrow O\mu + p$ ou $O + d\mu \rightarrow O\mu + d$ en fonction de l'énergie de collision. Les cadres du haut donnent les sections partielles par moment angulaire total J . Le cadre du bas donne les taux totaux comparés aux résultats expérimentaux (points noirs).

9.2.3. Dynamique réactionnelle en phase gazeuse (A. Dupays, B. Lepetit)

Une méthode utilisant les coordonnées hypersphériques elliptiques et dérivée de celle mise au point sur les systèmes muoniques a été développée pour traiter des réactions chimiques de système Lourd-Léger-Lourd. Dans le cadre de notre coopération avec le CSIC à Madrid, nous avons en effet l'opportunité de disposer de surfaces de potentiel électronique sur le système O+HF. Cette réaction présente un intérêt dans le cadre de la chimie atmosphérique. Notre méthode vient tout juste de donner les premiers résultats concernant les probabilités de transition état-à-état pour le moment angulaire nul. Des résultats utilisant l'approximation de découplage centrifuge pour des moments angulaires non nuls devraient être obtenus très prochainement.

En coopération avec A. Kuppermann à Caltech, nous avons repris des calculs sur l'effet de l'intersection conique entre les 2 surfaces $^2A'$ sur la réactivité du système H+H₂. Nous avons donc entrepris de mettre en place une méthode de calcul en coordonnées hypersphériques « row orthonormal », qui traite correctement toutes les singularités du problème et qui permettent de traiter les 2 surfaces de potentiel électroniques couplées. Les motivations de ce calcul sont :

- il y a actuellement une polémique sur l'existence ou non de traces de l'intersection conique (phase géométrique) dans les résultats expérimentaux
- tous les calculs à ce jour utilisent le potentiel électronique adiabatique fondamental, l'intersection conique étant traitée par l'ajout d'une phase géométrique. Notre calcul prend en compte les 2 surfaces électroniques diabatiques couplées, et inclut ainsi tous les effets liés à l'intersection conique, ainsi que les effets de non adiabaticité.
- d'un point de vue méthodologique, la réalisation de ce calcul nécessite l'utilisation d'harmoniques hypersphériques. La maîtrise de cette technologie devrait permettre d'envisager ensuite le traitement des problèmes à 4 corps.

A ce jour, nous avons pu mettre au point une méthode de calcul numérique efficace des harmoniques. Le programme informatique utilisant ces harmoniques sur ce système est en voie d'achèvement.

Projets :

Sur les systèmes lourds-légers-lourds, 2 axes de progrès possibles :

- prise en compte du couplage centrifuge dans le calcul des sections efficaces
- prise en compte de plusieurs surfaces de potentiel électronique couplées

Dans le prolongement des calculs sur $H+H_2$, nous envisageons de passer aux systèmes à 4 corps en développant une méthode de calcul des harmoniques efficace dans ce cas. La faisabilité d'un tel projet reste néanmoins à établir.

9.2.4. Processus ultrarapides induits, contrôlés et détectés par des impulsions femtosecondes (C. Meier)

Ce volet de recherche est réalisé en liaison directe avec différentes équipes expérimentales (B. Girard, LCAR Toulouse, L. Wöste, Berlin (coopération franco-allemande PROCOPE), K. Ohmori, IMS, Japon). Ces travaux ont porté sur la modélisation des expériences du type pompe-sonde sur différents systèmes, comme par exemple la molécule I_2 isolée et dans un gaz supercritique, ou les agrégats Na_2F et Na_3F . Pour les systèmes isolés, les modélisations théoriques sont basées sur une formulation quantique par propagation de paquets d'ondes. Pour des études de la dynamique femtoseconde des systèmes au sein d'un environnement, des méthodes de dynamique classique ou mixtes quantique/classique, comme la méthode MQCB, récemment développée dans notre équipe, sont utilisées.

Modélisation des expériences pompe-sonde de molécules en phase gazeuse ou dans un environnement

Dans le cas de la molécule I_2 , les modélisations tiennent compte de tous les degrés de liberté et ont mis en évidence un nouveau mécanisme d'interférence de paquet d'ondes vibrationnel. Ces résultats ont suscité des expériences inédites de l'équipe de K. Ohmori, (IMS, Japon) en collaboration avec l'équipe de B. Girard, confirmant les prédictions théoriques. Il s'agit des expériences mettant en évidence la possibilité de résoudre des structures quantiques à l'échelle du picomètre, qui se forment dans un temps de la femtoseconde. En outre, grâce à ce mécanisme, des résultats expérimentaux de A. Zewail de l'année 1996, ont pu être élucidés. Ces travaux ont été effectués dans le cadre d'une collaboration franco-allemande (PROCOPE) avec V. Engel de l'Université de Würzburg lors d'un stage de T. Lohmüller à Toulouse, ainsi qu'en collaboration directe avec le IMS, Okazaki, (Japon).

Dans le cadre des études des systèmes non-isolés, la méthode MQCB a été appliquée pour étudier des processus comme la relaxation et la décohérence vibrationnelles pour le système I_2 dans un gaz d'argon à haute pression. Comme résultat principal, il a été démontré comment un phénomène quantique universel (le 'revival' des paquets d'ondes) peut servir comme mécanisme pour mesurer un processus de décohérence par la spectroscopie femtoseconde. Ces travaux sont poursuivis par des études d'autres systèmes dont la dynamique sert de sonde pour des environnements complexes, tels que des matrices cryogéniques ou un environnement biologique.

Contrôle cohérent

Récemment, les dispositifs de mise en forme d'impulsion ont permis non seulement d'initier ou de détecter la dynamique moléculaire, mais aussi de la contrôler activement. Dans le cadre d'une collaboration avec le groupe de B. Girard (LCAR) (thèse de J. Degert), la possibilité de contrôler les fragments issus de la dissociation de la molécule NaI a été étudiée sur le plan théorique. Les résultats sont encourageants pour une éventuelle mise en évidence expérimentale de ce processus.

Par la suite, dans le cadre d'une collaboration PAI franco-allemande, un algorithme de contrôle dit 'local' a été testé en vue de son applicabilité à des systèmes complexes : il s'agit de déterminer à chaque instant le champ électrique optimal pour obtenir un objectif donné (par exemple excitation vers un état spécifique, excitation d'un mode de vibration spécifique...). Ce principe s'est révélé robuste, simple et fournissant des champs électriques avec une interprétation claire et simple. Des premiers résultats ont été obtenus pour des systèmes moléculaires simples ainsi que pour un modèle de chromophore dans un système biologique.

Dynamique femtoseconde de petits agrégats

Les études de la dynamique femtoseconde induite et détectée par des impulsions lumineuses ultrarapides ont été étendues à des petits agrégats et à des systèmes dans un environnement. Dans le premier cas, des expériences pompe-sonde menées récemment à Toulouse et à Berlin, ont permis l'observation en temps réel des mouvements vibrationnels de Na_2F et Na_3F . En collaboration avec M. C. Heitz, G. Durand et F. Spiegelman (LPQ, Toulouse), la dynamique des états excités induite par une impulsion lumineuse, est modélisée par une approche théorique qui permet de tenir compte des paramètres réalistes utilisés dans les différentes expériences. Le bon accord entre théorie et expérience confirme l'approche théorique proposée. En plus, la possibilité de considérer un champ laser externe de forme arbitraire devrait permettre d'étudier le contrôle des processus atomiques ultrarapides, ce qui constitue un nouvel axe de recherche. Non seulement le contrôle par impulsions lumineuses de différentes voies de fragmentation sera étudié, mais aussi la stabilisation dans différents isomères de l'agrégat Na_3F .

Projets :

- stabilisation de différents isomères de Na_3F par des impulsions mises en forme
- contrôle cohérent de l'ionisation de K_2 (expériences de T. Baumert, Kassel, Allemagne)
- dynamique femtoseconde de I_2 et I_3^- dans différents environnements complexes (solution, gaz supercritique)
- étudier les différents types d'environnements (ordonnés, désordonnés..) en vue de leur influence (décohérence, relaxation) sur un chromophore photoexcité

9.2.5. Méthodes hybrides classiques/quantiques (E. Gindensperger, C. Meier, J. A. Beswick, B. Lepetit)

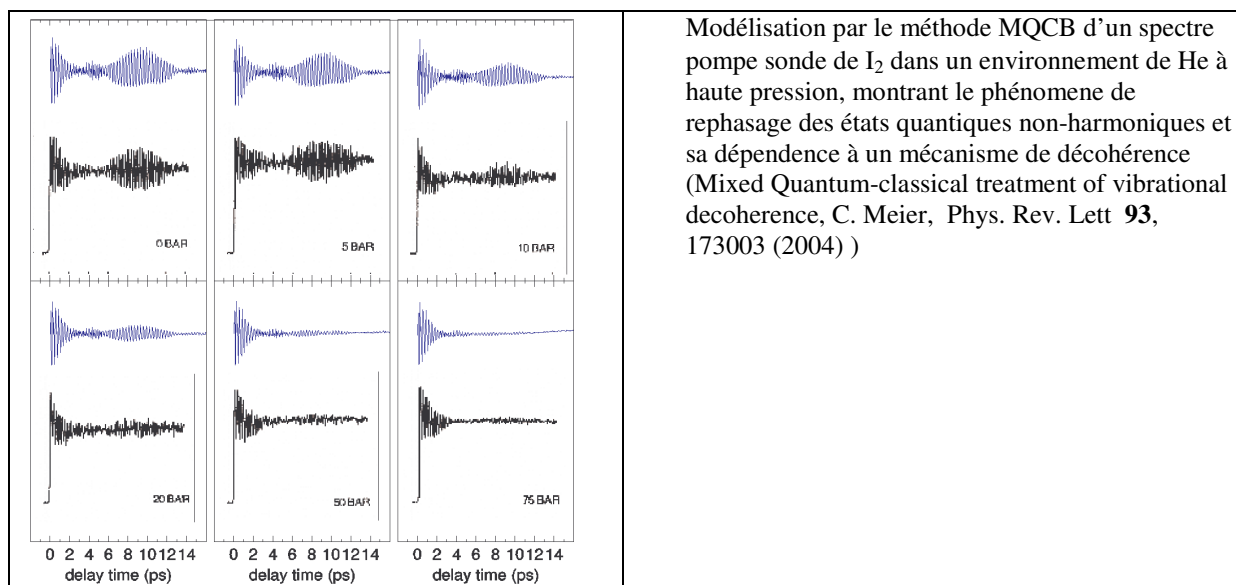
Un défi majeur dans le domaine de la dynamique moléculaire est de pouvoir étendre les études de relaxation et de contrôle à des cas où le nombre d'atomes impliqués augmente, et tendre ainsi vers la phase condensée. Ce domaine est actuellement en rapide développement expérimental et la modélisation est généralement faite par la technique de la dynamique moléculaire en utilisant des trajectoires classiques. Néanmoins, il existe de nombreuses situations où un traitement classique de certains degrés de liberté n'est pas adapté. Il est donc nécessaire de développer des méthodes mixtes qui traitent seulement certains degrés de liberté quantiquement, et le reste classiquement. Dans le cadre de la thèse de E. Gindensperger, soutenue en mai 2003, une nouvelle méthode mixte, basée sur l'interprétation de Bohm de la mécanique quantique a été mise au point (MQCB).

La méthode consiste à utiliser des trajectoires quantiques, associées à la fonction d'onde quantique, pour calculer l'interaction avec un grand nombre de degrés de liberté classiques. Cette méthode étant complètement nouvelle, des systèmes modèles de faible dimensionnalité ont d'abord été considérés. Puis, la méthode a été utilisée pour calculer la diffraction d'une molécule sur une surface et comparée à des résultats quantiques exacts (5D). Ces comparaisons ont montré un accord encourageant, ce qui laisse présager un vaste champ d'applications pour cette méthode. En outre, la méthode a été appliquée à des simulations de processus de décohérence vibrationnelle de I_2 dans un gaz rare à haute pression, donnant un très bon accord avec les résultats expérimentaux de A. Zewail (1996). Ces travaux ont suscité un grand intérêt, notamment à Berlin, où l'équipe du Prof. Schwentner est en train de réaliser des expériences similaires, visant à étudier différents types d'environnement et à contrôler des processus de relaxation et de décohérence.

Projets :

- extension de la méthode MQCB à des degrés quantiques discrets, ce qui permettra de traiter des transitions non-adiabatiques, par exemple pour les études de la dynamique d'agrégats comportant un plus grand nombre d'atomes.
- appliquer cette méthode à des problèmes de la dynamique des chromophores comme I_2 ou I_3^- , Cl_2 , Br_2 , HCl dans différents environnements. De nombreuses expériences du type pompe-sonde ont mis en évidence l'importance des interactions intra- et inter-moléculaires à l'échelle de la femtoseconde.
- amélioration de la méthode MQCB, qui est basée sur une hiérarchie d'approximations

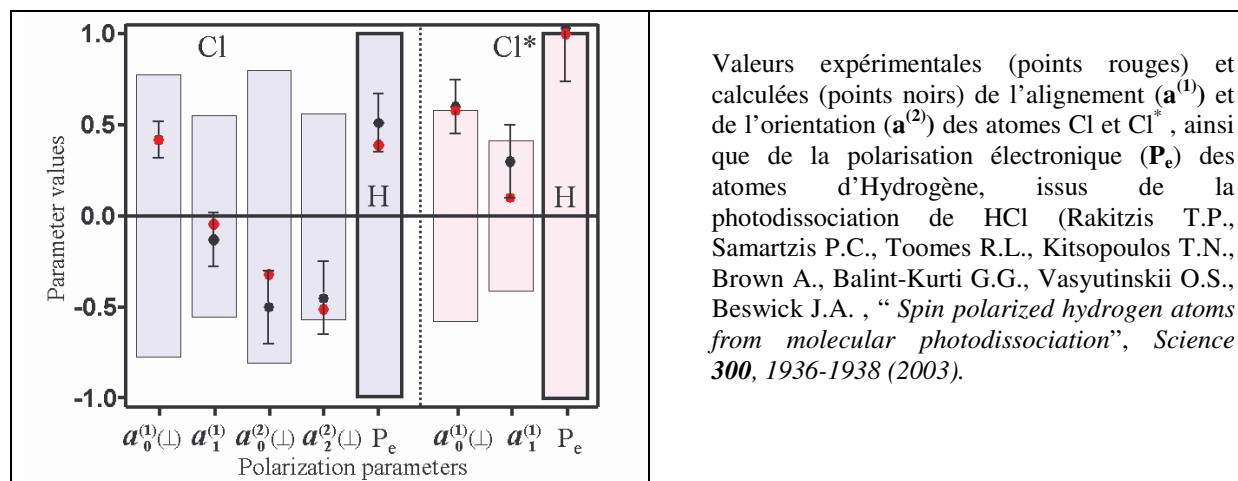
- développer des méthodes alternatives : méthode de grilles DVR dépendant du temps, associées à une base de polynômes de Hermite. La grille de points « suit » la trajectoire classique dans l'espace des configurations. Avec un point par degré de liberté, on obtient la mécanique classique. Avec suffisamment de points par degré de liberté, on retrouve la mécanique quantique. On disposera ainsi d'une méthode permettant d'évaluer l'erreur des méthodes hybrides.



9.2.6. Corrélations vectorielles dans les processus de photofragmentation (J. A. Beswick)

Outre la mesure des sections efficaces d'absorption et des rapports de branchement vers les différents états internes des fragments, qui sont des propriétés scalaires, un aspect important des études de photofragmentation est la détermination des propriétés vectorielles telles que les distributions angulaires des fragments, le degré de polarisation de la fluorescence émise par le système pendant ou après la fragmentation, et la polarisation du moment cinétique des fragments (orientation et alignement). Ce domaine de recherche s'est considérablement développé ces dernières années avec la mise au point des sources dans l'UV et la détection des fragments par les techniques d'imagerie des vitesses.

L'interprétation de ces expériences requiert le développement des techniques combinées de calcul des surfaces de potentiel et de la dynamique de fragmentation. En collaboration avec O. Vasyutinskii (IOFFE, St. Petersburg) et G. Balint-Kurti (Bristol) nous avons calculé l'alignement et l'orientation des deux fragments dans le cas de la photodissociation de HF et DF. Il s'agit d'un calcul complètement *ab initio* du problème (détermination des courbes de potentiel, couplages, moments dipolaires de transition, dynamique de fragmentation par paquets d'ondes). Ces méthodes ont ensuite été appliquées à d'autres systèmes et ont donné lieu à une collaboration avec l'équipe expérimentale de Peter Rakitzis (Héraclion, Crète) sur une méthode de production d'atomes d'hydrogène polarisés en spin à partir de la photodissociation de la molécule HCl (voir figure) Une analyse théorique sur l'utilisation de la technique d'imagerie ionique pour déterminer les moments d'ordre supérieur dans la distribution angulaire des photofragments a aussi été réalisée.



9.2.7. Dynamique réactionnelle gaz-surface (D. Lemoine, B. Lepetit, N. Lorente)

Ce thème étant récent dans l'équipe, l'emphasis est mise sur les projets. Trois axes faisant intervenir de l'hydrogène, sont explorés avec des approches quantiques. Deux d'entre eux s'appuient sur les collaborations engagées avec Bret Jackson (UMASS, Amherst) et Geert-Jan Kroes (Leyde, Pays-Bas), sur la recombinaison Eley-Rideal et sur la dissociation de H_2 , respectivement. Le nouvel axe présenté en **9.2.11**, vise à décrire des processus de diffusion en surface, induits ou non par STM.

Piégeage de H et formation Eley-Rideal de H_2 sur le graphite et sur le carbure de silicium

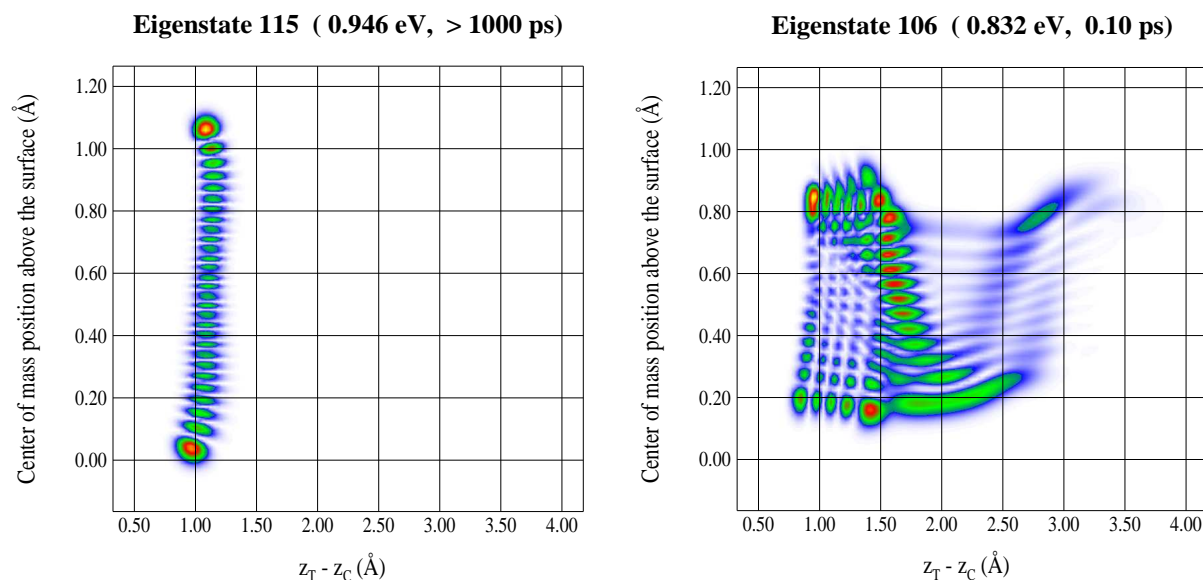
Le système hydrogène-surface est un système modèle pour l'étude de la formation de H_2 sur les grains interstellaires, ainsi que pour les interactions du plasma avec les parois de tokamak recouvertes de carbone. Les processus collisionnels Eley-Rideal caractérisent une recombinaison moléculaire par impact direct d'un atome H issu de la phase gazeuse avec un atome H préalablement adsorbé. L'actualité de ce sujet est renforcée par des expériences en cours dans les groupes de Küppers (Bayreuth, Allemagne), Price (University College London), Luntz (Odensee, Danemark), et Lemaire (LERMA, Cergy-Pontoise).

Nos calculs de section efficace par des méthodes de paquet d'ondes quantique ont révélé une réactivité Eley-Rideal très importante, atteignant des valeurs de l'ordre de $8\text{-}12 \text{ \AA}^2$ selon la nature physique ou chimique de l'adsorption, et selon le caractère soudain ou adiabatique de la collision. Dans le cas de la chimisorption, une liaison H-C d'environ 0.65 eV, se forme par extraction d'un atome de carbone du plan de la surface, avec un déplacement d'environ 0.4 Å, ce qui induit aussi une barrière de potentiel à la chimisorption d'environ 0.25 eV. La relaxation importante du graphite lors de la chimisorption de l'hydrogène, nous amène à considérer la vibration de l'atome C déplacé hors du plan de la surface, comme étant le degré de liberté le plus crucial parmi ceux que nous avons écartés jusqu'à présent. Sa prise en compte permettrait d'étudier l'influence de la relaxation du graphite au cours de la formation de H_2 , notamment en terme de section efficace de réaction.

Par ailleurs, nous avons développé un nouveau programme de calcul pour étudier le piégeage induit par résonance, d'un atome d'hydrogène dans le puits de chimisorption, qui constitue une étape limitante de la réaction de recombinaison. L'atome d'hydrogène doit franchir la barrière de potentiel à la chimisorption, soit à l'aide d'une énergie plus grande, soit par effet tunnel. Ceci correspond à peupler des états dits quasi-liés ou de résonance, qui par effet de cascade, peuvent mener l'atome d'hydrogène au fond du puits de potentiel et le coller effectivement au graphite, essentiellement par excitation des vibrations du réseau cristallin.

Dans un premier temps, il nous faut déterminer les états quantiques de résonance de l'interaction H-C-graphite à 3 dimensions, en fonction de la distance graphite-centre de masse de CH (Z) et des séparations H-C normale (z) et latérale (ρ), par rapport à la surface. L'outil de simulation est

le schéma itératif de Lanczos qui fait agir de manière répétitive le hamiltonien sur un vecteur initialement aléatoire. Les itérations successives permettent de construire une matrice tridiagonale, complexe symétrique (via l'utilisation d'un potentiel absorbant), dont la diagonalisation fournit les valeurs propres (énergies pour la partie réelle et largeurs inversement proportionnelles aux durées de vie, pour la partie imaginaire) des niveaux résonants, à partir desquelles on peut en déduire les états propres. Nous avons obtenu des premiers résultats pour la configuration colinéaire, en fonction des isotopes H, D et T, qui mettent en évidence les processus de résonance (notamment par l'attribution de deux nombres quantiques n et N , relativement à z et Z) ainsi que les effets isotopiques. Il faudra aussi bien sûr, étudier le rôle des vibrations du cristal et compléter au besoin par des propagations standard de paquets d'ondes quantiques.



a) cas d'un complexe stable : état ($n=0$, $N=28$) avec la plupart de l'énergie dans la vibration du centre de masse de CT avec la surface, bien localisé à $z = 1$ Å.

b) cas dissociatif : état ($n=4$, $N=14$) avec beaucoup d'énergie ($n=4$) dans la vibration interne T-C, "fuyant" dans le continuum (sommet de la barrière à $z = 1.8$ Å).

Alternativement, une étude comparative complète (calculs de structure électronique en fonctionnelle de densité + calculs de dynamique) est projetée sur le carbure de silicium en remplacement du graphite. En effet, des grains de SiC sont présents dans le milieu interstellaire, et SiC est aussi un des autres matériaux envisagés comme constituants des parois de tokamak.

L'approche de Lanczos, complétée au besoin par des propagations de paquets d'ondes, pourra être exploitée par la suite, pour traiter la dynamique de nano-objets en surface, soumis ou non à un champ STM. On peut finalement noter que le même programme de Lanczos, moyennant quelques modifications, est appliqué au calcul des résonances correspondant à des états vibrationnellement très excités de complexes de van der Waals tels que HeI_2 ou ArI_2 (cf 9.2.1).

Adsorption dissociative de H_2 sur les métaux

Ces processus constituent des étapes préliminaires pour la catalyse sur les métaux. Des résultats de calculs à six dimensions sur des faces (111), ont déjà été obtenus en 2001 pour le platine, et en 2002 pour le palladium et le cuivre. Les calculs sur le cuivre ont été étendus au cas d'un état moléculaire initial, vibrationnellement excité, soit pour $v=1$. Une autre direction de recherche concerne l'exploitation des symétries du groupe C_{4v} , au cours de la collision sous incidence normale, d'une molécule diatomique avec une surface de maille carrée. À terme, ceci nous permettra de repousser les limites des calculs quantiques, en considérant par exemple d'autres molécules que H_2 .

9.2.8. Effets inélastiques sur des molécules chimisorbées (N. Lorente, C. Meier)

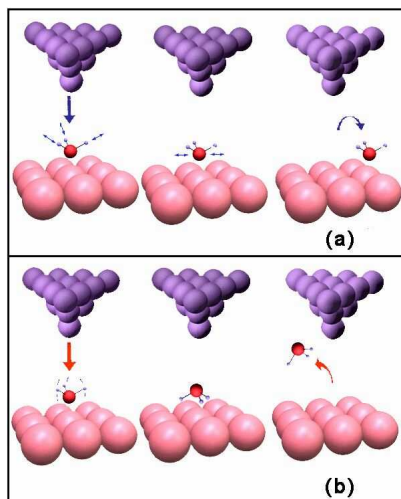
La collaboration avec J.I. Pascual de l'Institut Fritz Haber à Berlin, a permis de montrer la possibilité d'induire des réactions chimiques via un mode vibrationnel excité par STM. Ces résultats ont eu un écho important : une publication dans le journal Nature et 7 conférences invitées en 2003. Les calculs ont été déterminants pour montrer le lien entre vibration et réactivité, ainsi que les effets isotopiques typiques à toute vibration. Le calcul a aussi permis d'éclaircir le rôle des différents degrés de liberté (continuum d'excitations de surface, propagation de la molécule sur la surface, anharmonicités dues à la surface). Nous avons montré que le couplage entre modes sur une surface métallique devient important grâce au continuum d'excitations électroniques de la surface métallique. Notre méthode a permis de calculer la probabilité d'exciter une vibration lorsqu'un mode est déjà excité.

Nous venons de publier la première description des effets inélastiques induits par STM, ainsi que l'interprétation correcte de la spectroscopie vibrationnelle. En particulier nous avons trouvé un effet d'interférence important, dû aux effets d'échange avec les électrons au niveau de Fermi de la surface métallique du substrat. Cela montre que l'interprétation de la théorie n'est pas facile et qu'elle nécessite des calculs réalistes tels que les nôtres.

Nous avons aussi des résultats pour la molécule de benzène chimisorbée ainsi que pour les différents produits de réaction, suite à l'abstraction d'atomes d'hydrogène. De plus, nous poursuivons une collaboration avec le groupe de Kawai de l'institut Riken au Japon, où une molécule de Trans-2-butène sur Pd(110) est déshydrogénée.

Thomas Guillon, stagiaire DEA, a calculé l'excitation des modes C-H, symétrique et antisymétrique, de la molécule d'acétylène chimisorbée sur Ni(100). La structure électronique de Ni est très différente de celle de Cu, le niveau de Fermi étant dominé par les électrons à caractère d. Nous avons constaté que la proportion des modes présents dans le signal inélastique change beaucoup par rapport au cas de Cu. Cela met en évidence que la spectroscopie vibrationnelle de molécules chimisorbées donne une information importante sur les substrats.

Nous sommes très avancés dans le calcul et la compréhension des rotations induites sur les molécules. Pour une molécule d'acétylène sur une surface Cu(100), nous avons caractérisé quantiquement les surfaces de potentiel ainsi que les états rotationnels. Les calculs de désexcitation de la molécule montrent que ce sont les phonons de surface qui font changer l'état rotationnel de la molécule contrairement à ce qui était accepté. Ce travail a fait l'objet du stage de DEA de Vincent Rémi.



Suivant leur énergie, les électrons émis par la pointe du microscope (pyramide en bleu) excitent des vibrations différentes de la molécule d'ammoniac (azote en rouge, hydrogènes en blanc) déposée sur une surface du cuivre (en rose). En haut, la vibration d'élongation induit la translation de la molécule sur la surface. En bas, l'excitation du mode de vibration ressemblant à l'ouverture d'un parapluie fait désorber la molécule.

(Nature vol. 423, 29 mai 2003, pages 525-528 : « Selectivity in vibrationally mediated single-molecule chemistry » J.I. Pascual, N. Lorente, Z. Song, H. Conrad et H.-P. Rust)

9.2.9. Collisions ion-surface (N. Lorente)

Les calculs de structure électronique sur des surfaces nous permettent d'évaluer la probabilité de transfert de charge et les forces subies par un atome ou une molécule pendant une collision à basse énergie avec une surface solide. Nous avons étudié le cas du transfert de charge H-Ag(110). Nous avons trouvé une dépendance des produits de la collision avec l'angle azimutal de collision, mettant en évidence la structure ondulée de la face Ag(110). Les résultats de ces calculs ainsi que des simulations de trajectoires effectuées par P. Cafarelli sont publiés.

9.2.10. Effet Kondo et dissipation d'adsorbats magnétiques (N. Lorente, S. Radescu)

Un effort important pendant l'année 2003 a été le premier calcul *ab initio* d'une résonance Kondo. C'est une partie du travail postdoctoral de S. Radescu financé par l'ACI jeune chercheur. La caractérisation de la chimisorption d'un atome de Co sur la surface de Ag(111) a été effectuée. Nous avons trouvé que le Co est fortement chimisorbé, qu'il arrive à capturer un électron de la surface et qu'il est fortement magnétique avec un moment magnétique de 2.16 magnétons de Bohr sur la surface. Nous avons calculé les modes de vibration de Co, la dissipation du mouvement de Co sur la surface due à l'excitation des paires électron-trou de l'argent, ce qui est indispensable pour essayer de comprendre comment on peut manipuler des atomes magnétiques individuellement. L'effet Kondo est l'écrantage d'une impureté magnétique à basse température par un gaz d'électrons. C'est un effet dû à la corrélation électronique. Pour traiter ce problème nous avons introduit des opérateurs de boson esclave dans les équations de la fonctionnelle de la densité. Le but final est de calculer la dissipation due à la formation de la résonance Kondo, ce qui permettrait de montrer que les adsorbats magnétiques vont évoluer d'une façon inattendue lors de manipulations avec le microscope à effet tunnel.

9.2.11. Dynamique de nano-objets en surface (D. Lemoine, N. Lorente)

La microscopie à effet tunnel peut entre autre induire des réactions. Parmi les processus étudiés expérimentalement, on peut noter la diffusion de H sur Cu(100) à très basse température. Ce système est particulièrement intéressant du fait que l'étude peut être poursuivie en considérant un second adsorbat sur la surface, afin de simuler l'importance des processus de réaction Langmuir-Hinshelwood (du type diffusion thermique) et/ou ceux dus aux atomes chauds (du type collision le long de la surface), en compétition avec les réactions Eley-Rideal (du type collision directe gaz-adsorbat, cf 9.2.7). L'approche de Lanczos détaillée au 9.2.7 et complétée au besoin par des propagations de paquets d'ondes quantiques, sera utilisée.

9.2.12. Dynamique d'atomes et d'agrégats soumis à des champs intenses

Dynamique et propagation en champ intense (M.A. Bouchène)

En raison de l'arrivée de M.A. Bouchène dans l'équipe au terme du présent contrat, seuls les projets sont détaillés ici.

L'interaction de champs lumineux de très haute intensité avec des systèmes quantiques conduit à de nombreux phénomènes observés expérimentalement (Ionisation au dessus du seuil ATI, Génération d'harmoniques élevés, explosion d'agrégats...) dont la compréhension n'est pas parfaite. L'interaction peut aussi si le milieu est dense, influencer le profil temporel et spatial des champs au cours de la propagation. Le travail théorique proposé consiste à simuler différentes situations où des processus en champs forts peuvent être contrôlés. Il s'agit de raffiner l'interaction (champs excitateurs

corrélés en phase ou de forme complexe) permettant par le jeu d'interférences quantiques de jouer sur le résultat de cette interaction. Plus précisément, les thèmes suivants seront abordés :

Interaction champ fort-système atomique

Identification des situations où l'ionisation du système par ATI conduit à une émission centrée sur un seul pic électronique préalablement choisi. De même pour la génération d'harmoniques.

Propagation d'impulsions intenses dans des systèmes complexes

La propagation d'impulsions lumineuses dans des milieux denses est un domaine qui intéresse diverses communautés dont celle des plasmas. Les applications sont diverses et vont du contrôle de la décharge de la foudre dans l'atmosphère à la télédétection atmosphérique. Il s'agit de transposer le savoir-faire acquis dans les états liés atomiques avec entre autre, l'idée de contrôle par modification des champs excitateurs.

Interaction champ fort- agrégat

Ce travail entre dans le cadre d'une collaboration avec l'équipe d'Eric Suraud du LPT qui a mis en place un code de dynamique moléculaire pour l'étude de la dynamique d'agrégats en champ intense. Il s'agira d'optimiser l'apparition de particules fortement chargées et énergétiques.

Conclusions et perspectives

Sur les quatre dernières années, l'activité de l'équipe s'est développée dans plusieurs directions complémentaires, dont certaines s'inscrivent dans un contexte de collaborations au sein du laboratoire. Les études sur les processus femtosecondes ont été étendues aux petits agrégats (équipes Agrégats et Femtoseconde) et aux processus en interaction avec un environnement, ce qui constitue un premier pas vers des études en phase liquide. De nouveaux axes de recherche ont été initiés : la dynamique des atomes exotiques (en lien avec C. Rizzo), la dynamique des interactions gaz-surface avec l'arrivée de D. Lemoine qui contribue à renforcer la cohésion des axes de recherche de notre équipe. L'ACI obtenue par N. Lorente en 2001 a permis de démarrer une activité sur les propriétés magnétiques des adsorbats. Outre l'ACI, des financements de divers programmes de coopération ont permis de maintenir et de développer de nombreuses collaborations nationales et internationales, reconnues et impliquant tous les membres de l'équipe. La récente arrivée de M.A. Bouchène va permettre de développer des études de dynamique d'atomes et d'agrégats soumis à des champs intenses, et de propagation d'impulsions intenses.

Concernant les moyens humains, outre l'arrivée de D. Lemoine et de M.A. Bouchène, on espère que le flux de doctorants au sein de l'équipe, puisse se maintenir dans les années futures. Les divers financements ont permis d'accueillir de nombreux visiteurs, dont quelques post-doctorants.

Concernant les moyens de calcul, nous avons accès à des centres de calcul performants, nationaux (IDRIS, CINES) et régional (CALMIP). Ces moyens sont complétés par des moyens locaux, plus souples d'utilisation et à disposition de l'ensemble des membres de notre laboratoire, telle une station de travail COMPAQ bi-processeur achetée fin 2001. Cet outil maintenant dépassé doit être renouvelé en 2006, probablement sous la forme d'une grappe de PCs.

9.3. Les collaborations nationales et internationales

Dates	Programme/ financement	Correspondant	Université/ Institut-ville	Pays	Thème	Publications
15/11-15/12 2002	PR invité	N. Lorente	Chalmers	Suède		
1/10-15/12 2002	poste rouge	N. Lorente	Lyngby	Danemark		
1/03-15/03 2002	PROCOPE	C. Meier	Würzburg	Allemagne	spectroscopie pompe-sonde	
24/11-5/12 2003	PROCOPE	C. Meier	Würzburg	Allemagne	contôle cohérent	
2002-2003	NATO	B. Lepetit	Sofia	Bulgarie	Atomes exotiques	
24/11 2004 -5/12 2005	PROCOPE	N. Lorente	Berlin	Allemagne	Images STM inélastique	
2004-2005	DREI- CNRS	B. Lepetit	Sofia	Bulgarie	Atomes exotiques	
2004-2005	DREI- CNRS	B. Lepetit	CSIC- Madrid	Espagne	Dynamique réactionnelle	
2004-2005	APC UPS	B. Lepetit	Caltech	USA	Phase géométrique	
2002-2005	APC UPS 2005	D. Lemoine	UMASS, Amherst	Etats-Unis	Dynamique hydrogène-graphite	10, 13, 16, 30, 56
2002-2005	PAI van Gogh 2002	D. Lemoine	Leyde	Pays-Bas	Dissociation de H ₂ sur les métaux	9, 14, 41, 57
2002		D. Lemoine	Fritz Haber- Berlin	Allemagne	Photodésorption de CO/Cr ₂ O ₃	15
2002		D. Lemoine	Bayreuth- Max Planck Garching	Allemagne	Recombinaison de HD sur le graphite	16
2002		D. Lemoine	Bordeaux		Dissociation de H ₂ sur Pd(111)	9

9.4. Les soutiens financiers obtenus au cours des 4 années pour votre projet.

Dates	Programme	Titre du projet	Montant
2002-2003	ACI Jeune Chercheur		61 keuros
2002-2004	PROCOPE	Modélisation par des trajectoires Bohmiennes	4 keuros
2002-2004	PROCOPE	Modélisation des expériences pompe-sonde	4 keuros
2004-2006	PROCOPE	Effets inélastiques induits localement sur une molécule déposée	4 keuros
2002-2003	NATO	Atomes exotiques	5 keuros
2002-2003	PICASSO	Complexes de Van der Waals	4 keuros
2004-2005	DREI CNRS	Dynamique réactionnelle	6 keuros
2004-2005	DREI CNRS	Atomes exotiques	4 keuros
2004	APC UPS	Phase géométrique	2 keuros
2005	APC UPS	Chimisorption de H	1 keuros

9.5. Les publications

1.5.1. Revues à comité de lecture

1. **Gindensperger E., Meier C., Beswick J.-A.**, “*Quantum-classical dynamics including continuum states using Bohmian trajectories*”, *J. Chem. Phys.* 116, 8-13 (2002).
2. **Beswick J.-A.**, “*Quantum hopping techniques applied to vibrational energy transfer*”, *Comp. Phys. Comm.* **145**, 64 (2002).
3. G. Lèveque, G. Colas des Francs, C. Girard, J-C. Weeber, **C. Meier**, R. Mathevet, C Robilliard, J. Weiner, *Polarization state of the optical near field*, *Phys. Rev. E* 65 036701 (2002)
4. Lèveque G., **Meier C.**, Mathevet R., Robilliard C., Weiner J., Girard C., Weeber J.-C., “*Atomic diffraction from nanostructural optical potentials*,” *Phys. Rev. A* 65, 053615 (2002)
5. **E. Gindensperger, C. Meier, J.A. Beswick** et M.-C. Heitz, “*Quantum-classical description of rotational diffractive scattering using Bohmian trajectories: Comparison with full quantum wave packet results*”, *J. Chem. Phys.* 116 10051 (2002)
6. **C. Meier**, V. Engel, “*Time-resolved photoelectron spectroscopy of molecular dissociation: Classical trajectory versus quantum wave packet calculations*”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 4, 5014 (2002)
7. Bastida A., Zuñiga J., Requena A., Miguel B., **Beswick J.-A.**, Vigue J., Halberstadt N., “*Molecular dynamics simulation of the $I_2(x)$. Ar isomers population in a free-jet expansion : Thermodynamics versus Kinetic control*,” *J. Chem. Phys.* 116, 1944 (2002)
8. Balint-Kurti G., Brown A., **Beswick J.A.**, Vasyutinskii O.S., “*Vector correlations and alignment parameters in the photodissociation of HF and DF*”, *J. Chem. Phys.* **116**, 10760 (2002)
9. Busnengo H.F., Pijper .E, Somers M.F., Kroes G.J., Salin A., Olsen R.A., **Lemoine D.**, Dong W., “*Six-dimensional quantum and classical dynamics study of $H_2(n=0, J=0)$ from Pd(111)*”, *Chem. Phys. Lett.* 356 (2002) 515–522.
10. **Lemoine D.**, Quattrucci .J.G., Jackson B., “*Efficient Eley-Rideal reactions of H atoms with single Cl adsorbates on Au(111)*”, *Phys. Rev. Lett.* 89 (2002) 268302–1–4.
11. **Lepetit B., Lemoine D.**, “*State resolved ArHBr photodissociation quantum dynamics*”, *J. Chem. Phys.* 117 (2002) 8676–8685.
12. Nave S., **Lemoine D.**, “*Quantum mechanical studies of helium atoms scattering from isolated CO molecules on metal surfaces*”, *J. Phys.: Condens. Matter* 14 (2002) 6263–6280.
13. Sha X., Jackson B., **Lemoine D.**, “*Quantum studies of Eley-Rideal reactions between H atoms on a graphite surface*”, *J. Chem. Phys.* 116 (2002) 7158–7169.
14. Somers M.F., Kingma S.M., Pijper E., Kroes G.J., **Lemoine D.**, “*Six-dimensional quantum dynamics of scattering of ($v=0, j=0$) H_2 and D_2 from Cu(111): test of two LEPS potential energy surfaces*”, *Chem. Phys. Lett.* 360 (2002) 390–399.
15. Thiel S., Klüner T., **Lemoine D.**, Freund H.J., “*Rovibrational preexcitation in the photodesorption of CO from Cr_2O_3* ”, *Chem. Phys.* 282 (2002) 361–370.

16. Zecho T., Güttler A., Sha X., **Lemoine D.**, Jackson B., Küppers J., “*Abstraction of D chemisorbed on graphite (0001) with gaseous H atoms*”, Chem. Phys. Lett. 366 (2002) 188–195.
17. F.E. Olsson, M. Persson, **N. Lorente**, L.J. Lauhon, and W. Ho, “*Vibrational and Electronic Properties of acetylene, ethynyl and dicarbon chemisorbed on copper*”, J. Phys. Chem. B 106, 8161 (2002)
18. **B. Lepetit**, O. Roncero, A.A. Buchachenko, N. Halberstadt, “*Electronic and vibrational predissociation in ArI₂ photodissociation dynamics*”, J. Chem. Phys. 116 (2002) 8367-8375
19. G. Léveque, **C. Meier**, R. Mathevet, B. Viaris, J. Weiner et C. Girard, “*Designing experiments for the study of atom diffraction from nanostructured optical potentials*”, Eur. Phys. J. D. 20, 219 (2003)
20. M.-C. Heitz, G. Durand, F. Spiegelman, and **C. Meier**, *Time-resolved photoelectron spectra as probe of excited state dynamics: a full quantum study of the Na₂F cluster*, J.Chem. Phys., 118 1282 (2003).
21. J.I. Pascual, **N. Lorente**, Z. Song, H. Conrad et H.-P. Rust, «*Selectivity in vibrationally mediated single-molecule chemistry*», Nature 423, 525 (2003)
22. **N. Lorente**, M.F.G. Hédoüin, R. E. Palmer, M. Persson, «*Chemisorption of benzene and STM dehydrogenation products on Cu(100)*», Phys. Rev. B 68, 15401-1 (2003)
23. P. Cafarelli, M. Richard-Viard, C. Bénazeth, N. Nieuwjaer, **N. Lorente**, «*Simulations of the azimuthal distribution of low-energy H atoms scattered off Ag(110) at grazing incidence : DFT many-body versus model pair potentials*», Nucl. Inst. Methods B 203, 211 (2003)
24. F.E. Olsson, **N. Lorente**, and M. Persson, “*STM images of molecularly and atomically chemisorbed oxygen on silver*”, Surf. Sci. 522, L27 (2003)
25. A. Buchachenko, N. Halberstadt, **B. Lepetit**, O. Roncero «*Ar...I₂ : a model system for complex dynamics*”, Int. Rev. Phys. Chem. 22 (2003) 153-202
26. **A. Dupays**, **B. Lepetit**, **J.A. Beswick**, C. Rizzo, D. Bakalov «*Calculation of muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen*”, Phys. Rev. A 67 (2003) 062505-1 – 062505-6
27. **A. Dupays**, **J.A. Beswick**, **B. Lepetit**, C. Rizzo, D. Bakalov «*Proton Zemach radius from measurement of the hyperfine splitting of hydrogen and muonic hydrogen*”, Phys. Rev. A 68 (2003) 052503-1 - 052503-5
28. **A. Dupays**, **J.A. Beswick**, **B. Lepetit**, C. Rizzo, D. Bakalov «*Hyperspherical elliptic coordinates treatment of muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen*”, Phys. Rev. A 68 (2003) 062506-1 – 062506-5
29. **Lemoine D.**, “*A note on orthogonal discrete Bessel representations*”, J. Chem. Phys. 118 (2003) 6697–6699.
30. Quattrucci J.G., Jackson B., **Lemoine D.**, “*Eley-Rideal reactions of H atoms with Cl adsorbed on Au(111): quantum and quasiclassical studies*”, J. Chem. Phys. 118 (2003) 2357–2366.

31. M.-C. Heitz, G. Durand, F. Spiegelman, and **C. Meier** “*Theoretical study of the time-resolved photoelectron spectrum of Na₂F: effects of thermal initial conditions*” Eur. Phys.J. D. **24**, 181 (2003)
32. Degert J., **Meier C.**, Chatel B., Girard B., “*Coherent control of matter wave interferences in molecular predissociation*”, Phys. Rev. A **67**, 041402R/1-4 (2003).
33. Rakitzis T.P., Samartzis P.C., Toomes R.L., Kitsopoulos T.N., Brown A., Balint-Kurti G.G., Vasyutinskii O.S., **Beswick J.A.**, “*Spin polarized hydrogen atoms from molecular photodissociation*”, Science **300**, 1936-1938 (2003).
34. Elyukhina O.V., Vasyutinskii O.S., **Beswick J.A.**, “*Using ion imaging to analyze higher-order moments of the angular distribution of photofragments*”, Optics and Spectroscopy **9**, 369-373 (2003)
35. T. Frederiksen, M. Brandbyge, **N. Lorente** and A.-P. Jauho “*Inelastic scattering and local heating in atomic gold wires*”, Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 256601.
36. **N. Lorente** and J.I. Pascual “*Mode-specific strategy for controlling a single-molecule reaction*”, Phil. Trans. R. Soc. **362** (2004) 1227.
37. **N. Lorente** , “*Mode excitation induced by the scanning tunneling microscope*”, Applied Physics A **78**, 799 (2004)
38. F. Olsson, A.-G. Borisov, M. Persson, **N. Lorente**, A. Kazansky and J.-P. Gauyacq *Decay and dephasing of the Cu(100) image states induced by Cu adatoms* Phys. Rev. B **70** (2004) 205417.
39. **A. Dupays, B. Lepetit, J.A. Beswick, C. Rizzo, D. Bakalov** « *Non-zero total angular momentum three-body dynamics using hyperspherical elliptic coordinates. Application to muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen and neon* », Phys. Rev. A **69** (2004) 062501-1 – 062501-8
40. B.D. Obreshkov, D. Bakalov, **B. Lepetit**, K. Szalewicz «*Collision quenching of antiprotonic helium atoms in gaseous helium*», Phys. Rev. A **69** (2004) 042701-1 – 042701-6
41. **A. Dupays**, «*Isotopic effects in the muon transfer from $p\mu$ and $d\mu$ to heavier atoms*», Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 043401-1 – 043401-4
42. Somers M.F., **Lemoine D.**, Kroes G.J., “*Performance and application of a symmetry adapted pseudo spectral method for scattering of a diatomic molecule from a square surface: H₂ +Cu(111)*”, Chem. Phys. **304** (2004) 59–77.
43. T. Lohmüller, **C. Meier**, V. Engel, **J. A. Beswick** “*Fractional Revivals in the ro-vibrational motion of I₂*”, J. Chem. Phys. **120**, 10442-10449 (2004)
44. G. Durand, M.-C. Heitz, F. Spiegelman, **C. Meier**, R. Mitric, V. Bonacic-Koutecky, J. Pittner “*Theoretical absorption spectra and conformational changes in ground and excited states of Na₃F*”, J. Chem. Phys., **121**, 9898 (2004)
45. M.-C. Heitz, G. Durand, F. Spiegelman, **C. Meier**, R. Mitric, V. Bonacic-Koutecky “*Ultrafast excited state dynamics of the Na₃F cluster: Quantum wave packet and classical trajectory calculations compared to experimental results*”, J. Chem. Phys. **121**, 9906 (2004)
46. **J.A. Beswick**, A.G. Suits, O. Vasyutinskii, D. Zimmermann “*Possibility of a complete experiment in molecular dynamics*”, Adv. Chem. Phys. (Russie) **23**, 46-52 (2004).

47. **C. Meier** “*Mixed Quantum-classical treatment of vibrational decoherence*”, Phys. Rev. Lett **93**, 173003 (2004)
48. **C. Meier, J. A. Beswick** “*Femtosecond pump-probe spectroscopy of I₂ in a dense rare gas environment: A theoretical study based on the MQCB method*”, J. Chem. Phys. **121**, 4550-4558 (2004)
49. **E. Gindensperger, C. Meier, and J. A. Beswick** “*Hybrid quantum/classical dynamics using Bohmian trajectories*”, Adv. Quantum Chem. **47**, 331-346 (2004).
50. **N. Lorente, R. Rurali, H. Tang**, « *Single-molecule manipulation and chemistry with the STM* », J. Phys.: Condens. Matter **17**, S1049 (2005).
51. **R. Rurali, N. Lorente** “*Metallic and semimetallic Silicon <110> nanowires*”, Phys. Rev. Lett. **94**, 026805 (2005)
52. **R. Rurali, N. Lorente** “*On the properties of surface reconstructed silicon nanowires*”, Nanotechnology **16**, S250 (2005).
53. **H. Ueba, T. Mii, N. Lorente, B.N.J. Persson** “*Adsorbate motions induced by inelastic-tunneling current: theoretical scenarios of two-electron processes*”, J. Chem. Phys. **123**, 084707 (2005).
54. **N. Lorente, H. Ueba** “*CO dynamics induced by tunnelling electrons: differences on Cu(110) and Ag(110)*”, EPJ D DOI: 10.1140/epjd/e2005-00214-6.
55. **D. Bakalov, J.A. Beswick, A. Dupays, C. Rizzo**, « *Proton Zemach radius and the hyperfine splitting of the ground state of muonic hydrogen* », Can. J. Phys. **83** (2005) 351-356
56. **O. Roncero, A.A. Buchachenko, B. Lepetit**, « *Competition between adiabatic and non adiabatic fragmentation pathways in the unimolecular decay of ArI₂(B) van der Waals complex* », J. Chem. Phys. **122** (2005) 034303-1 – 03430303-12.
57. **X. Sha, B. Jackson, D. Lemoine, B. Lepetit**, “*Quantum studies of H atom trapping on a graphite surface*”, J. Chem. Phys. **122** (2005) 014709–1–8.
58. **Nave S, Lemoine D, Somers MF, Kingma SM, Kroes GJ**, “*Six-dimensional quantum dynamics of scattering of (v=0,j=0) D₂ and of (v=1,j=0) H₂ from Cu(111)*”, J. Chem. Phys. **122** (2005) 214709–1–9.
59. **S. Gräfe, C. Meier and V. Engel** “*Instantaneous dynamics and quantum control fields: principle and numerical applications*”, J. Chem. Phys. (accepté 2005).
60. **M.-C. Heitz and C. Meier** “*Laser control of vibrational excitation in carboxy-hemoglobin: a quantum wave packet study*”, J. Chem. Phys. (accepté 2005)

9.5.2. Conférences invitées, cours écoles thématiques

1. J.A. Beswick, Non adiabatic transitions in muon transfer collisions, Spectroscopy and dynamics on multiple surfaces, *Telluride, USA août 2003*.
2. J.A. Beswick, CCP6 on Vector correlation and alignment in chemistry, Bristol, 20-23 juillet 2005 : Polarization of photofragments' fluorescence: the semiclassical treatment.

3. D. Lemoine, “*Notions sur les approches de paquet d’ondes quantiques*”, 2^{de} journée des théoriciens de la Fédération LUMAT, Orsay, le 8 Mars 2004.
4. D. Lemoine, “*Theoretical dynamics of recombinative collisions of gas phase atoms with atoms adsorbed on surfaces*”, European Conference “Atomic and Molecular Physics” ECAMP VIII, Rennes, du 6 au 10 Juillet 2004.
5. D. Lemoine, “*Dynamique quantique des interactions hydrogène-surface*”, Colloque interdisciplinaire “Interaction de l’hydrogène avec des surfaces”, Observatoire de Paris, les 13 et 14 Juin 2005.
6. D. Lemoine, “*Resonance states in the chemisorption of hydrogen atoms on the graphite (0001) surface*”, 13th Workshop “Quantum Atomic and Molecular Tunneling in Solids and other Condensed Phases” QAMTS, Saint Jacques de Compostelle, Espagne, du 27 au 31 Juillet 2005.
7. B. Lepetit, Les Houches, QED, Quantum Vacuum and the search for New Forces, 5-9 juin 2005 : Muon transfer between hydrogen and heavier atoms“
8. B. Lepetit, Dresde, novembre 2005 : „Hyperspherical approach to charge transfer and reaction dynamics“
9. N. Lorente : Psik 2000 workshop: Total energy methods in Computational Condensed Matter, *La Laguna, Tenerife, Spain, Janvier 2002*
10. N. Lorente : Mode excitation and reaction pathways induced by the scanning tunneling microscope, 13th International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, *Prague, Czech Republic, 30 juillet–2 août 2003*
11. N. Lorente : Mode excitation and reaction pathways induced by the scanning tunneling microscope, CECAM-ESF/Psi-k Workshop on Electronic Transport in Molecular Systems *CECAM, Lyon, France, 2-5 Juin 2003*
12. N. Lorente: Processus inélastiques induits par le microscope à effet tunnel : spectroscopie vibrationnelle et réactivité contrôlée, Atelier de printemps “Physique des SurfaceS et Nanostructures”. *Cargèse, 25-30 mai 2003*
13. N. Lorente: Processus inélastiques induits par le microscope à effet tunnel : spectroscopie vibrationnelle et réactivité contrôlée, Académie de Sciences de l’Institut de France et Académie des Sciences de la Société Royale du Canada, Colloque conjoint Molécules et Nanoscience, *La Grande Motte, France, 6-9 avril 2003*
14. N. Lorente : Mode excitation and reaction pathways induced by the scanning tunneling microscope, Hauptvortrag dans la réunion de printemps de la société allemande de physique, *DPG, Dresden, Allemagne, 24-28 mars 2003*
15. N. Lorente: Scanning tunneling microscope theory: elastic and inelastic currents, Winter school on scanning probe microscopy and spectroscopy. *Delmenhorst, Allemagne, 4-7 février 2003*
16. N. Lorente: Mode selective chemistry induced by tunneling electrons. Organisateur: M. B. Lepetit et E. Surraud (Toulouse). Condensed Matter Theory conference *Toulouse 22–26 septembre 2003*.
17. N. Lorente: Inducing controlled atomic dynamics by an electron current. Organisateur: A. Salin (Bordeaux) et P.M. Echenique (San Sebastian). Workshop on Molecule-surface interactions *San Sebastian, Espagne 8–11 septembre 2004*
18. N. Lorente: Inducing controlled atomic dynamics by an electron current. Organisateur : T. Komeda (Tohoku) et J. Yoshinobu (ISSP, Tokyo). Workshop on Surface and Nano Science *ISSP Tokyo, Japan, 2–4 august 2004*.

19. N. Lorente: Total-energy calculations as the basis of electronic transport calculations: the need of self-consistent electron-vibration couplings. CECAM; Workshop on State of the art developments and perspectives of real-space electronic structure techniques in condensed matter and molecular physics, Lyon 20 – 24 juin 2005.
20. C. Meier : Mixing quantum and classical mechanics using Bohmian trajectories ITAMP workshop on Computational Approaches to Time-Dependent Quantum Dynamics, *Harvard, mai 2002*
21. C. Meier : Une nouvelle méthode mixte quantique/classique PAMO, Physique Atomique, Moléculaire et Optique, *Bourges, juin 2002*
22. C. Meier : Mixing quantum and classical mechanics: The MQCB method and its applications, CECAM-workshop: Currents, trajectories and their applications in Quantum dynamics *Lyon, septembre 2002*
23. C. Meier : Dynamique femtoseconde et décohérence vibrationnelle de I₂ dans un gaz rare à haute pression, 8ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones, *Strasbourg, septembre 2002*
24. C. Meier : Mécanismes de décohérence quantique: I₂ dans un gaz rare à haute pression GDR Femtochimie en Solution, *Pont-à-Mousson, décembre 2002*
25. C. Meier : Mixing quantum and classical mechanics: The MQCB method and its applications International Summer school on electron transport in nanostructures, *Toulouse, mai 2003*
26. C. Meier : JPU 2003, *Mittelwihr, Octobre 2003*
27. C. Meier : Réunion du SFB : « Analysis and Control of Ultrafast Photoinduced processes » *Berlin. Allemagne, Octobre 2004*
28. C. Meier : Journée thématique : «Contrôle et dynamique sous champs laser » *Paris, mars 2005*
29. C. Meier : GDR « Agrégation, Fragmentation et Thermodynamique des Systèmes complexes », *Porquerolles, mars 2005*
30. C. Meier : « Quantum dynamics of complex molecular systems », University of Florida Research Center, Paris, *mai 2005*
31. C. Meier : Workshop on : « Molecular dynamics : Chemistry and Mathematics » of the DFG Schwerpunktsprogramm : « Multiscale problems », *Blaubeuren, Allemagne, juin 2005*

10. Collisions froides électron – molécule à haute résolution avec des photoélectrons synchrotron

Jean-Pierre Ziesel (DR2)

10.1. Collaboration 2002-2005

David Field (IFA, Université d'Aarhus, Danemark)
Nykola Jones (ISA, Université d'Aarhus, Danemark)
Nigel Mason (The Open University, Milton Keynes, Angleterre)
Thomas Field (The Queen's University, Belfast, Irlande du Nord)
Søren Vrønning Hoffmann (ISA, Université d'Aarhus, Danemark)

Réseau Européen 2002-2005: Electron and Positron Induced Chemistry

10.2. Compte-rendu de l'activité scientifique

Le but de ce programme est l'étude expérimentale de la diffusion totale d'électrons par des molécules. L'originalité de notre expérience sur l'anneau synchrotron ISA-Astrid à Aarhus est :

- la mesure des sections efficaces absolues, intégrale (diffusion de 0 à 180°) et vers l'arrière (90-180°), ce qui nous permet le calcul des paramètres de diffusion;
- la très haute résolution (1 meV) pour une meilleure précision aux très basses énergies où les sections efficaces, incluant un facteur $E^{-\alpha}$, peuvent croître très rapidement.

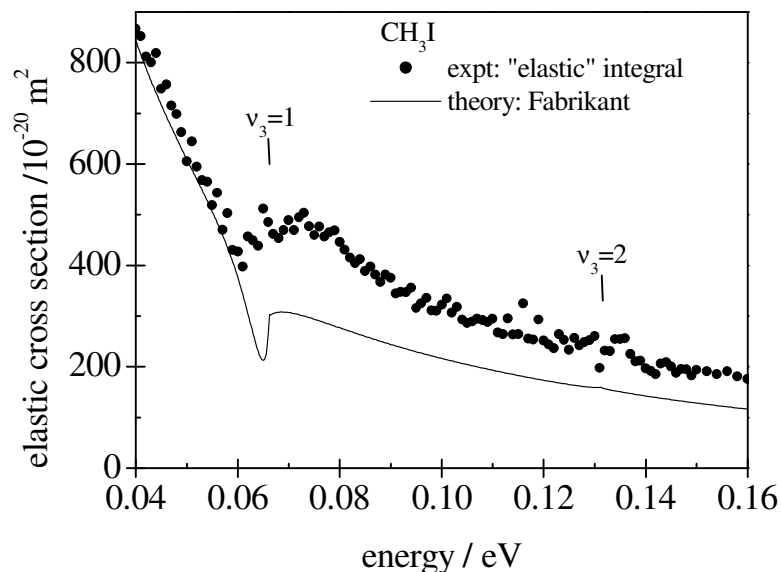
Dans la source de notre appareil EMS, l'argon est photoionisé à 78,659 nm, près du seuil $^2P_{3/2}$, et le faisceau d'électrons produits dans une bande passante étroite est extrait et focalisé dans une chambre de transmission pour la diffusion totale. La variation des sections efficaces intégrales avec l'énergie est obtenue par atténuation du faisceau par collision sur le gaz; avec l'addition d'un champ magnétique axial, nous mesurons la diffusion totale vers l'arrière. Les sections efficaces absolues intégrales et vers l'arrière sont mesurées typiquement dans les domaines d'énergie 15 meV-10 eV et 8 meV-650 meV, respectivement.

10.2.1 Excitation rotationnelle de molécules polaires: CH_3X (X= Cl, I, CN), H_2O [11, A1]

Dans les molécules CH_3X , l'excitation rotationnelle est prédominante à basse énergie et se manifeste en particulier par une diffusion de l'électron très fortement pointée vers l'avant. Par exemple dans CH_3I à 15 meV, la section efficace intégrale calculée, dans la 1^{ère} approximation de Born, est de 2133 \AA^2 à comparer à notre mesure de diffusion totale de 3869 \AA^2 et à l'attachement dissociatif $\Gamma / \text{CH}_3\text{I}$ de 100 \AA^2 [1]. La section efficace élastique déduite de cet ensemble de données est en très bon accord avec un calcul de matrice-R [2], en particulier pour la position (différence de 2 meV) et l'amplitude (100 \AA^2) de la fenêtre due à une résonance de Feshbach vibrationnelle sous le seuil $\nu_3 = 1$.

¹ A. Schramm, I.I. Fabrikant, J.M. Weber, E. Leber, M.-W. Ruf, H. Hotop, J. Phys. B **32**, 2153 (1999).

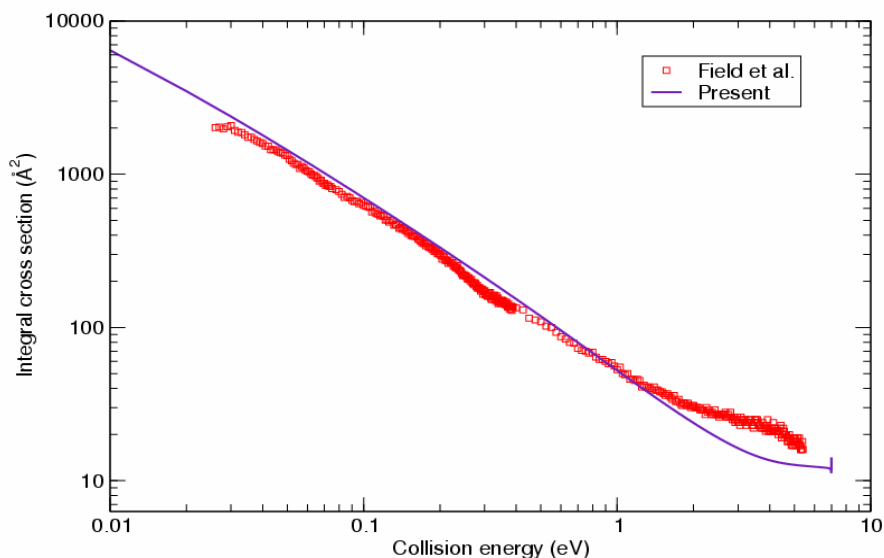
² M. Allan, I.I. Fabrikant, J. Phys. B **35**, 1025 (2002).



Cependant, dans CH_3CN la section efficace n'est que de 3300 \AA^2 à 15 meV alors que, du fait d'un moment dipolaire μ de 3.92 D, la section efficace rotationnelle calculée, approximativement proportionnelle à μ^2 , est de 13000 \AA^2 . Ce défaut d'excitation rotationnelle directe est confirmé par le rapport de la section efficace vers l'arrière à la section intégrale qui est proche de 0,5 aux très basses énergies. Le processus prédominant pourrait donc être une diffusion-s par l'influence d'un état lié dipolaire [3].

Dans H_2O , nos sections efficaces totales peuvent être comparées à des calculs récents [4] des sections efficaces vibrationnellement élastiques avec la méthode de matrice-R. L'accord général est bon pour la diffusion intégrale (figure ci-dessous) mais la théorie surestime la diffusion vers l'arrière d'environ 30%.

Total Integral cross section for e- H_2O



³ C. Desfrancois, H. Abdoul-Carime, C. Adjouri, N. Khelifa, J.-P. Schermann, *Europhys.Lett.* **26**, 25 (1994).

⁴ A. Faure, J.D. Gorfinkiel, J. Tennyson, *J. Phys. B* **37**, 801 (2004).

10.2.2. Diffusion élastique et état virtuel: CS₂, C₆F₆, p-C₆H₄F₂, p-C₆H₄(CH₃)₂ [P2,P6,P7]

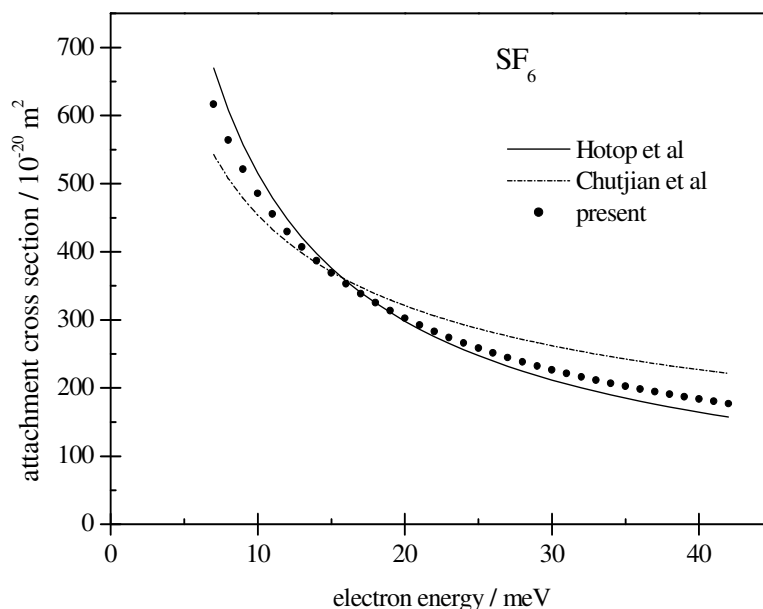
Dans des molécules non-polaires et sans processus d'attachement à très basse énergie, la section efficace de diffusion élastique peut néanmoins prendre une valeur élevée par l'effet d'un état virtuel. Ce type d'état est produit par le potentiel électron($\ell=0$)-molécule dont le puits est presque assez profond pour supporter un état lié. Expérimentalement, la diffusion par état virtuel se caractérise par un rapport des sections efficaces arrière / intégrale tendant vers 0,5 aux très basses énergies et une longueur de diffusion A_0 négative.

Dans CS₂, cet effet est visible bien qu'une série de résonances "géantes" superposées au fond élastique rende l'analyse difficile. Par contre, dans le p-difluorobenzène et le p-xylène ainsi que dans C₆F₆, nous avons pu déterminer, en utilisant la théorie MERT ("Modified Effective Range Theory"), les déphasages s et p ainsi que les longueurs de diffusion-s A_0 avec leur signe, qui est négatif.

10.2.3. Diffusion élastique et attachement électronique: CCl₄, SF₆ [P5, P6, P8]

En présence d'attachement (réaction), les expressions de la diffusion élastique, que nous avons dérivées à partir des éléments s et p de la matrice S, prennent en compte l'interdépendance des voies réactive et de diffusion (Davydov, *Quantum Mechanics*, Pergamon 1976).

Dans le cas où les sections efficaces absolues d'attachement sont soit inconnues, soit en désaccord, il est possible de les estimer indépendamment par ajustement entre nos mesures de diffusion totale et les expressions dérivées, en traitant la section efficace d'attachement comme un paramètre supplémentaire. Dans CCl₄ et SF₆, les sections efficaces d'attachement-s ainsi dérivées sont en bon accord avec les mesures du groupe de Hotop [5,6] et en désaccord avec celles du groupe de Chutjian [7,8], toutes ces données absolues précédentes ayant été obtenues indirectement par normalisation.



⁵ D. Klar, M.-W. Ruf, H. Hotop, *Int. J. Mass Spectr.* **205**, 93 (2001).

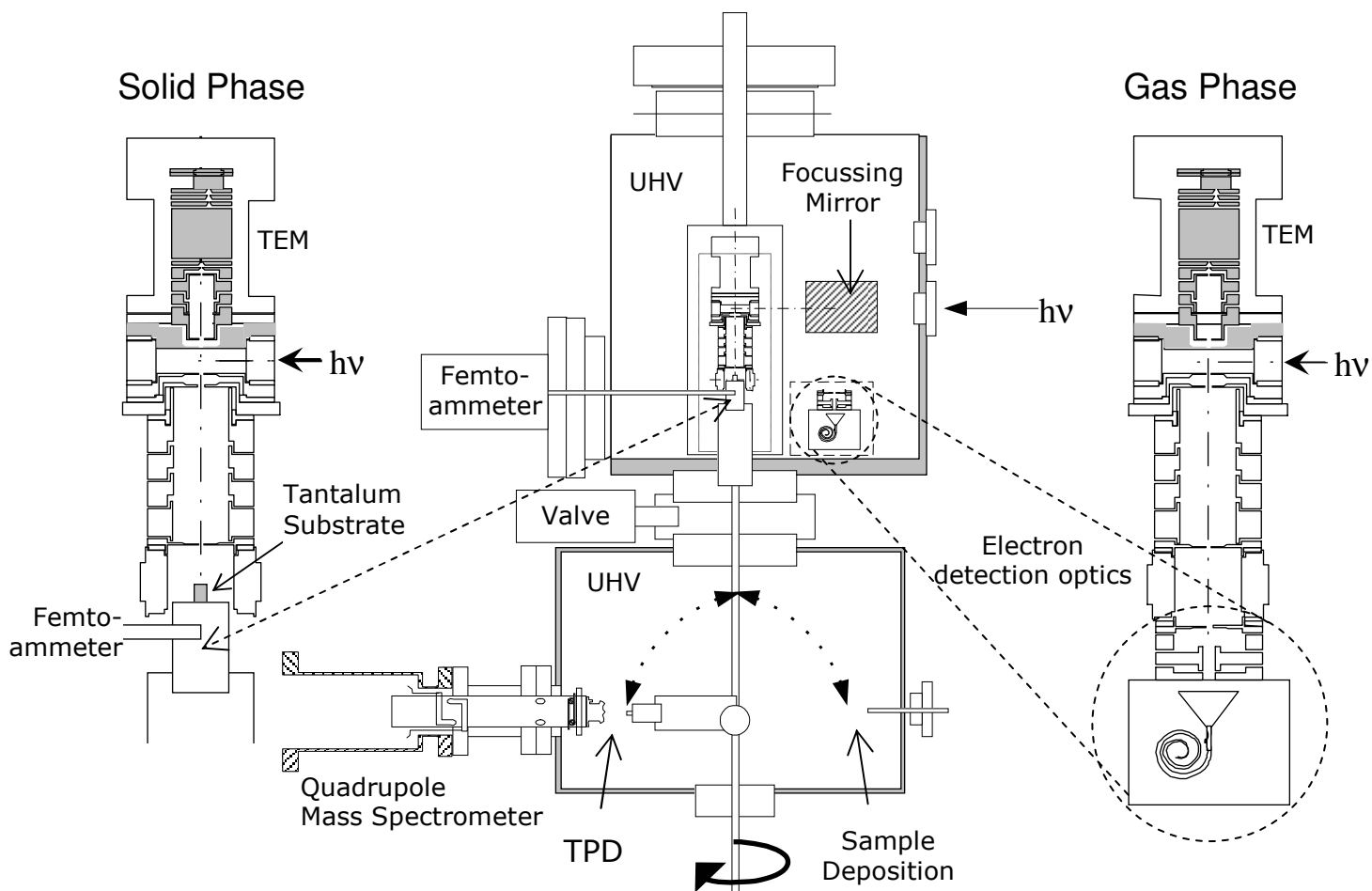
⁶ D. Klar, M.-W. Ruf, H. Hotop, *Aust. J. Phys.* **45**, 263 (1992).

⁷ A. Chutjian, S.H. Alajajian, *Phys. Rev. A* **31**, 2885 (1985).

⁸ P.-T. Howe, A. Kortyna, M. Darrach, A. Chutjian, *Phys. Rev. A* **64**, 042706 (2001).

10.2.4. Nouvel instrument pour l'étude des interactions électron-solide moléculaire[A2]

Un appareil a été construit pour l'étude des interactions d'électrons de basse énergie avec des solides moléculaires. La source d'électrons est toujours la photoionisation par le rayonnement synchrotron à la station Astrid-SGM2. L'expérience est actuellement en cours de test et un schéma de l'appareil, qui garde la capacité d'étudier la transmission en phase gazeuse, est montré ci-dessous.



Des couches moléculaires seront condensées sur un substrat de Ta, refroidi actuellement à 77K, dans la chambre de préparation et l'échantillon ensuite transféré dans la chambre supérieure, en ligne avec le canon à électrons. La transmission de notre faisceau d'électrons à travers les couches d'adsorbat sera mesurée avec un femto-ampèremètre. Cette méthode est bien adaptée à la détection de l'attachement à très basse énergie. De plus, les produits de l'irradiation par électrons pourront être analysés par désorption thermique et spectrométrie de masse quadrupolaire dans la chambre de préparation. Un monochromateur d'électron trochoidal (TEM) est également inclus pour des expériences à plus basse résolution, par exemple pour une étude préliminaire des effets chimiques des électrons à des énergies de quelques centaines de meV ou plus. Les molécules étudiées seraient dans un premier temps des fréons ainsi que, dans le futur, d'autres molécules "astrochimiques" (éthanol, méthanol, acétonitrile, ammoniac...) pures, en mélange et/ou sur couches de glace amorphe et des molécules d'intérêt biologique.

10.3. Activités internationales

Collaboration de J.-P. Ziesel sur les collisions d'électrons de très basse énergie avec l'équipe de D. Field (Département de Physique et Astronomie, Université d'Aarhus, Danemark) ainsi qu'avec N.J. Mason (The Open University, Milton Keynes, Angleterre) et T.A. Field (Queen's University, Belfast, Irlande du Nord).

Cette collaboration a été soutenue en 2002 par une convention de coopération CNRS - SNF (Danemark) ainsi que, depuis 2002 et jusqu'en 2005, par le programme "Access to Research Infrastructures" de l'Union Européenne.

10.4. Publications

10.4.1. Publications dans des revues à comité de lecture

2002

- [P1] **D. Field, N.C. Jones, J.-P. Ziesel**, "Cold collisions of electrons with molecules", *Few-Body Systems* **31**, 191-7 (2002).
- [P2] **D. Field, N.C. Jones, J.-P. Ziesel, T.A. Field**, "Giant resonances in cold electron scattering by CS₂", *Phys. Rev. Lett.* **89**, 093201/ 1-4 (2002).
- [P3] **S.V. Hoffmann, S.L. Lunt, N.C. Jones, D. Field, J.-P. Ziesel**, "An undulator based spherical grating monochromator beamline for low energy electron-molecule scattering experiments", *Rev. Sci. Instr.* **73**, 4157-63 (2002).
- [P4] **D. Field, N.C. Jones, J.-P. Ziesel**, "Cold encounters: electrons and molecules", *EuroPhysics News* **6**, 196-7 (2002).

2003

- [P5] **J.-P. Ziesel, N.C. Jones, D. Field, L.B. Madsen**, "Reaction and scattering in cold electron collisions", *Phys. Rev. Lett.* **90**, 083201/ 1-4 (2003).

2004

- [P6] **D. Field, N.C. Jones, J.-P. Ziesel**, "Cold electron scattering in SF₆ and C₆F₆: bound and virtual state channels", *Phys. Rev. A.* **69**, 052716-1/11 (2004).

2005

- [P7] **D. Field, N.C. Jones, T.A. Field, J.-P. Ziesel**, "Virtual state scattering with cold electrons: para-xylene and para-difluorobenzene", *J. Chem. Phys.* **122**, 074301-1/8 (2005).
- [P8] **J.-P. Ziesel, L.B. Madsen, N.C. Jones, D. Field**, "Electron attachment cross-sections in CCl₄ and SF₆ from total scattering data", *J. Chem. Phys.* **122**, 024309-1/7 (2005).

10.4.2. Communications avec actes

2002

- [C1] **D. Field, S.L. Lunt, N.C. Jones, J.-P. Ziesel**, "Cold collisions of electrons with molecules: virtual state scattering in CO₂", *Photonic, Electronics and Atomic Collisions (XXII ICPEAC) Proceedings* (Rinton Press, 2002).

- [C2] **D. Field, N.C. Jones, J.-P. Ziesel**, "Time delays and cold collisions", Proc. International Meeting on Electron Scattering from Atoms, Nuclei, Molecules and Bulk Matter , Cambridge (Kluwer Academic/Plenum NY, 2002)

2003

- [C3] **N.C. Jones, D. Field, S.V. Hoffmann, J.-P. Ziesel, T.A. Field**, "Giant resonances in cold electron scattering by CS₂", XXIII ICPEAC, Stockholm (2003)
- [C4] **D. Field, N.C. Jones, L.B. Madsen, S.V. Hoffmann, J.-P. Ziesel**, "Low-energy electron-molecule scattering from CCl₄ , SF₆ and C₆F₆" , XXIII ICPEAC, Stockholm (2003)

2004

- [C5] **D. Field, J.-P. Ziesel, N.C. Jones, S.V. Hoffmann, L.B. Madsen**, "The determination of absolute electron attachment cross-sections from beam scattering data", ECAMP 8 (8th European Conference on Atomic and Molecular Physics), Rennes.
- [C6] **I. Struve, P. Callihane, N.C. Jones, S.V. Hoffmann, L.B. Madsen, D. Field, J.-P. Ziesel**, "Cold electron scattering by a chiral molecule", ECAMP 8, Rennes.

10.4.3. Conférences invitées

2003

- [I1] **J.-P. Ziesel, D. Field, N.C. Jones, S.V. Hoffmann, S.L. Lunt, T.A. Field, N.J. Mason**, "Total scattering of cold electrons by molecules", EMS-03 (International Symposium on Low Energy Electron-Molecule Collisions and Swarms), Prague, Colloque satellite du XXIII ICPEAC.

2005

- [I2] **D. Field, N.C. Jones, J.-P. Ziesel**, "Cold electrons in plasmas and molecular interactions", SAPP XV (15th Symposium of Plasma Processes), Podbanské, Slovaquie.
- [I3] **D. Field, N.C. Jones, L.B. Madsen, J.-P. Ziesel, T.A. Field**, "Cold association of electrons and molecules" , PARYS workshop (Ultracold Plasmas and Rydberg Systems), Gif-sur-Yvette.

10.4.4. Affiches

2005

- [A1] **N.C. Jones, T.A. Field, J.-P. Ziesel, J.D. Gorfinkiel, A. Faure, J. Tennyson, D. Field**, "Low-energy electron scattering from water", EPIC-EIPAM 2005 (Electron and Positron Induced Chemistry -Electron Induced Processes At the Molecular level), Viterbo, Italie.
- [A2] **P. Cicman, R. Balog, N.C. Jones, J.-P. Ziesel, D. Field**, "A new instrument to study cold electron- solid interactions", EPIC-EIPAM 2005, Viterbo, Italie.

11. Publications de l'ensemble du laboratoire

11.1. Publications dans des revues avec comité de lecture

2002

- [J1] **G. Balint-Kurti, A. J. Orr-Ewing, J. A. Beswick, A. Brown, O. S. Vasyuntinskii**
Vector correlations and alignment parameters in the Photodissociation of HF and DF
J. Chem. Phys. **116**, 10760 (2002).
- [J2] **A. Bastida, J. Zuñiga, A. Requena, B. Miguel, J. A. Beswick, J. Vigué, N. Halberstadt**
Molecular dynamics simulation of the $I_2(x)\dots Ar$ isomers population in a free jet expansion: thermodynamics versus kinetic control
J. Chem. Phys. **116**, 1944-53 (2002).
- [J3] **J. A. Beswick**
Quantum hopping techniques applied to vibrational energy transfer
Comp. Phys. Comm. **145**, 64-77 (2002).
- [J4] **A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu**
Comment on 'Experimental study of single-and double-electron transfer in slow $Ne^{8+} + He$ collisions using photon and electron spectroscopy'
Phys. Rev. A **65**, 066701/1-4 (2002).
- [J5] **M. A. Bouchene**
Dynamique et interférences de paquets d'ondes dans les alcalins
Ann. Phys. **27**, 1-58 (2002).
- [J6] **M. A. Bouchene**
Phase Control of Dispersion Effects for an Ultrashort Pulse-train Propagating in a Resonant Medium
Phys. Rev. A **66**, 065801/1-4 (2002).
- [J7] **H. F. Busnengo, E. Pijper, M. F. Somers, G. J. Kroes, A. Salin, R. A. Olsen, D. Lemoine, W. Dong**
Six-dimensional quantum and classical dynamics study of $H_2(v=0, J=0)$ from Pd(111)
Chem. Phys. Lett. **356**, 515-22 (2002).
- [J8] **J. Degert, W. Wohlleben, B. Chatel, M. Motzkus, B. Girard**
Realization of a time domain Fresnel lens with coherent control
Phys. Rev. Lett. **89**, 203003/1-4 (2002).
- [J9] **J. C. Delagnes, M. A. Bouchene**
Compensation of electron wave packet spreading with linearly chirped pulses : theoretical analysis
J. Phys. B **35**, 1819-30 (2002).
- [J10] **R. Delhuille, C. Champenois, M. Büchner, L. Jozefowski, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué**
Hith-Contrast Mach-Zehnder lithium-atom interferometer in the Bragg regime
Applied Physics B **74**, 489-93 (2002).

- [J11] **R. Delhuille, A. Miffre, E. Lavalette, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué, H. J. Loesch, J. P. Gauyacq**
Optimization of a Langmuir-Taylor detector for Lithium
Review of Scientific Instruments **73**, 2249-58 (2002).
- [J12] **D. Field, N. C. Jones, J. P. Ziesel, T. A. Field**
Cold collisions of electrons with molecules
Few-Body Systems **31**, 191-7 (2002).
- [J13] **D. Field, N. C. Jones, J. P. Ziesel, T. A. Field**
Giant resonances in cold electron scattering by CS₂
Phys. Rev. Lett. **89**, 093201/1-4 (2002).
- [J14] **E. Gindensperger, C. Meier, J. A. Beswick, M.-C. Heitz**
Quantum-classical description of rotational diffractive scattering using Bohmian trajectories: Comparison with full quantum wave packet results
J. Chem. Phys. **116**, 10051-59 (2002).
- [J15] **E. Gindensperger, C. Meier, J. A. Beswick**
Quantum-classical dynamics including continuum states using quantum trajectories
J. Chem. Phys. **116**, 8-13 (2002).
- [J16] **S. V. Hoffmann, S. L. Lunt, N. C. Jones, D. Field, J. P. Ziesel**
An undulator based spherical grating monochromator beamline for low energy electron-molecule scattering experiments
Rev. Sci. Instr. **73**, 4157-63 (2002).
- [J17] **A. Le Padellec, G. F. Collins, H. Danared, A. Källberg, F. Hellberg, K. Andersson, D. Hanstorp, M. Larsson**
Relative cross sections for the Electron Impact Single Detachment on Li
J. Phys. B **35**, 3669-76 (2002).
- [J18] **D. Lemoine, J. G. Quattrucci, B. Jackson**
Efficient Eley-Rideal reactions of H atoms with single Cl adsorbates on Au(111)
Phys. Rev. Lett. **89**, 268302/1-4 (2002).
- [J19] **B. Lepetit, O. Roncero, A. Buchachenko, N. Halberstadt**
Electronic and vibrational predissociation in ArI₂ photodissociation dynamics
J. Chem. Phys. **116**, 8367-75 (2002).
- [J20] **B. Lepetit, D. Lemoine**
State resolved ArHBr photodissociation quantum dynamics
J. Chem. Phys. **117**, 8676-85 (2002).
- [J21] **G. Lévêque, C. Meier, R. Mathevet, C. Robilliard, J. Weiner, C. Girard, J.-C. Weeber**
Atomic diffraction from nanostructured optical potentials
Phys. Rev. A **65**, 053615-19 (2002).
- [J22] **G. Lévêque, C. Meier, R. Mathevet, B. Viaris de Lesegno, J. Weiner, C. Girard**
Designing experiments for the study of atom diffraction from nanostructured optical potentials
Euro. Phys. J. AP **20**, 219-26 (2002).

[J23] **G. Lévêque, G. Colas des Francs, C. Girard, J.-C. Weeber, C. Meier, R. Mathevet, C. Robilliard, J. Weiner**

Polarization state of the near optical field

Phys. Rev. E. **65**, 036701-1-8 (2002).

[J24] **M. Lezius, V. Blanchet, M. Y. Ivanov, A. Stolow**

Polyatomic molecules in strong laser fields: Nonadiabatic multielectron dynamics

J. Chem. Phys. **117**, 1575-88 (2002).

[J25] **R. Mathevet, R. Delhuille, C. Rizzo**

Computation of the phase induced by non-newtonian gravitational potentials in atom interferometry

Classical and Quantum Gravity **19**, L37-44 (2002).

[J26] **C. Meier, V. Engel**

Time-resolved photoelectron spectroscopy of molecular dissociation: Classical trajectory versus quantum wave-packet calculations

Phys. Chem. Chem. Phys. **4**, 5014-19 (2002).

[J27] **A. Miffre, R. Delhuille, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo, J. Vigué**

The three-grating Mach-Zehnder optical interferometer: a tutorial approach using particle optics

European Journal of Physics **23**, 623-35 (2002).

[J28] **E. A. Naji, T. Nzeyimana, X. Urbain, A. Le Padellec**

Merged beam study of the associative ionisation $O^- + D^+ / O^+ + D^-$ and $C^+ + D^-$

J. Phys. B **35**, 4325-34 (2002).

[J29] **S. Nave, D. Lemoine**

Quantum mechanical studies of helium atoms scattering from isolated CO molecules on metal surfaces

J. Phys.: Condens. Matter **14**, 6263-80 (2002).

[J30] **C. Nicole, M. A. Bouchene, B. Girard**

Dynamics and Interference of fine-structure wave packets created by strong ultrashort pulses

Journal of Modern Optics **49**, 183-200 (2002).

[J31] **T. Nzeyimana, E. A. Naji, X. Urbain, A. Le Padellec**

Merged beam study of the associative ionisation (C^+ , N^+ and O^+) + O^-

Euro. Phys. J. D. **19**, 315-25 (2002).

[J32] **F. Olsson, M. Persson, N. Lorente, L. J. Lauhon, W. Ho**

Vibrational and Electronic Properties of acetylene, ethynyl and dicarbon chemisorbed on copper

J. Phys. Chem. B **106**, 8161-71 (2002).

[J33] **J. Ramirez Serrano, W. Degraffenreid, J. Weiner**

Polarization-Dependent Spectra in the Photoassociative Ionization of Cold Atoms in a Bright Sodium Beam

Phys. Rev. A **65**, 052719/1-8 (2002).

[J34] **D. Rayane, I. Compagnon, R. Antoine, M. Broyer, P. Dugourd, P. Labastie, J. M. L'Hermite, A. Le Padellec, G. Durand, F. Calvo, F. Spiegelman, A. R. Allouche**
Electric dipole moments and polarizabilities of single excess electron sodium fluoride clusters: Experiment and theory
J. Chem. Phys. **116**, 10730-38 (2002).

[J35] **X. Sha, B. Jackson, D. Lemoine**
Quantum studies of Eley-Rideal reactions between H atoms on a graphite surface
J. Chem. Phys. **116**, 7158-69 (2002).

[J36] **M. F. Somers, S. M. Kingma, E. Pijper, G. J. Kroes, D. Lemoine**
Six-dimensional quantum dynamics of scattering of ($v=0, j=0$) H_2 and D_2 from Cu(111): test of two LEPS potential energy surfaces
Chem. Phys. Lett. **360**, 390-99 (2002).

[J37] **S. Thiel, T. Klüner, D. Lemoine, H. J. Freund**
Rovibrational preexcitation in the photodesorption of CO from Cr_2O_3
Chem. Phys. **282**, 361-70 (2002).

[J38] **M. Wollenhaupt, A. Assion, D. Liese, C. Sarpe-Tudoran, T. Baumert, S. Zamith, M. A. Bouchene, B. Girard, A. Flettner, U. Weichmann, G. Gerber**
Interferences of ultrashort free electron wave packets
Phys. Rev. Lett. **89**, 173001/1-4 (2002).

[J39] **T. Zecho, A. Güttler, X. Sha, D. Lemoine, B. Jackson, J. Küppers**
Abstraction of D chemisorbed on graphite (0001) with gaseous H atoms
Chem. Phys. Lett. **366**, 188-95 (2002).

[J40] **R. Zemih, M. Boudjema, C. Bénazeth, Y. Boudouma, A. C. Chami**
Image potential effect on the specular reflection coefficient of alkali ions scattered from a nickel surface at low energy
NIM B **193**, 396-402 (2002).

2003

[J41] **A. Al Khalili, S. Rosen, H. Danared, A. M. Derkatch, A. Källberg, M. Larsson, A. Le Padellec, A. Neau, J. Semaniak, R. Thomas *et al.***
Absolute High-Resolution Rate Coefficients for Dissociative Recombination of Electrons with HD^+ : Comparison of Results from Three Heavy Ion Storage Rings
Phys. Rev. A **68**, 042702/1-14 (2003).

[J42] **V. Blanchet, S. Boyé, S. Zamith, A. Campos, B. Girard, J. Lievin, D. Gauyacq**
(3 + 1)-resonantly enhanced multiphoton ionization-photoelectron spectroscopy of the (3d-4s) supercomplex of acetylene: The geometry of the E state revisited through experiment and theory
J. Chem. Phys. **119**, 3751-62 (2003).

[J43] **A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu**
An accurate test of calculated positions and lifetimes for $Ne^{6+}(1s^2 3lnl')^1L$ states ($n=3-5$) using a high resolution electron spectroscopy
NIM B **205**, 74-7 (2003).

- [J44] **A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu**
High-resolution electron spectroscopy of the $1s^2 3lnl'$ Be-like series in oxygen and neon. Test of theoretical data. I-Experimental method and theoretical background
J. Phys. B **36**, 47-64, corrigendum: *J. Phys. B*, **36**, 801 (2003).
- [J45] **A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu**
High-resolution electron spectroscopy of the $1s^2 3lnl'$ Be-like series in oxygen and neon. Test of theoretical data. II-Experimental results
J. Phys. B **36**, 65-92 (2003).
- [J46] **M. A. Bouchene**
Radial focusing of electron wave packets using linearly chirped intense pulses
Phys. Rev. A **68**, 023401/1-10 (2003).
- [J47] **A. Buchachenko, N. Halberstadt, B. Lepetit, O. Roncero**
Ar...I₂ : a model system for complex dynamics
Int. Rev. Phys. Chem. **22**, 153 (2003).
- [J48] **M. Büchner, R. Delhuille, C. Robilliard, J. Vigué, A. Miffre, C. Champenois**
Diffraction phases in atom interferometers
Phys. Rev. A **68**, 013607/1-4 (2003).
- [J49] **P. Cafarelli, M. Richard-Viard, C. Bénazeth, N. Nieuwjaer, N. Lorente**
Simulations of the azimuthal distribution of low energy H atoms scattered off Ag(110) at grazing incidence : DFT many-body versus model pair potentials
NIM B **203**, 211-17 (2003).
- [J50] **C. Cappelli, A. Rizzo, B. Mennucci, J. Tomasi, R. Cammi, G. L. J. A. Rikken, R. Mathevet, C. Rizzo**
The Cotton-Mouton effect of furan and its homologues in the gas phase, for pure liquids and in solution
J. Chem. Phys. **118**, 10712-24 (2003).
- [J51] **B. Chatel, J. Degert, S. Stock, B. Girard**
Competition between sequential and direct paths in a two-photon transition
Phys. Rev. A **68**, 041402R/1-4 (2003).
- [J52] **J. Degert, C. Meier, B. Chatel, B. Girard**
Coherent control of matter-wave interference in molecular predissociation
Phys. Rev. A **67**, 041402R/1-4 (2003).
- [J53] **J. C. Delagnes, V. Blanchet, M. A. Bouchene**
Role of the radiated field in the propagation of an ultra-short chirped pulse.
Optics Communications **227**, 125-31 (2003).
- [J54] **A. Dupays, B. Lepetit, J. A. Beswick, C. Rizzo, D. Bakalov**
Calculation of muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen
Phys. Rev. A **67**, 062505/1-6 (2003).
- [J55] **A. Dupays, J. A. Beswick, B. Lepetit, C. Rizzo, D. Bakalov**
Hyperspherical elliptic coordinates treatment of muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen
Phys. Rev. A **68**, 062506/1-5 (2003).

- [J56] **A. Dupays, J. A. Beswick, B. Lepetit, C. Rizzo, D. Bakalov**
Proton Zemach radius from measurement of the hyperfine splitting of hydrogen and muonic hydrogen
Phys. Rev. A **68**, 052503/1-5 (2003).
- [J57] **O. V. Elyukhina, O. S. Vasyuntinskii, J. A. Beswick**
Using ion imaging to analyze higher-order moments of the angular distribution of photofragments
Optics and Spectroscopy **94**, 369-373 (2003).
- [J58] **K. Fritioff, D. Hanstorp, J. Sandström, A. Ehlerding, M. Larsson, G. F. Collins, D. J. Pegg, H. Danared, A. Källberg, A. Le Padellec**
Electron-impact detachment of Cl
Phys. Rev. A **68**, 012712/1-8 (2003).
- [J59] **M.-C. Heitz, G. Durand, F. Spiegelman, C. Meier**
Theoretical study of the time-resolved photoelectron spectrum of Na₂F: effects of thermal initial conditions
Eur. Phys. J. D **24**, 181-4 (2003).
- [J60] **M.-C. Heitz, G. Durand, F. Spiegelman, C. Meier**
Time-resolved photoelectron spectra as probe of excited state dynamics: a full quantum study of the Na₂F cluster
J. Chem. Phys. **118**, 1282-91 (2003).
- [J61] **M. Jacquy, S. Bonhommeau, M. A. Bouchene**
Experimental demonstration of phase control of dispersion effect for an ultrashort pulse train propagating in a resonant medium
Opt. Lett. **28**, 1272-74 (2003).
- [J62] **G. Laurent, M. Tarisien, X. Fléchar, P. Jardin, L. Guillaume, P. Soboscinski, L. Adoui, A. Bordenave-Montesquieu, D. Bordenave-Montesquieu, J. Y. Chesnel, F. Frémont, D. Hennecart, E. Liénard, L. Maunoury, P. Moretto-Capelle, A. Cassimi**
Coincident Auger electron and recoil ion momentum spectroscopy for low-energy ion-atom collisions
NIM B **205**, 546-9 (2003).
- [J63] **D. Lemoine**
A note on orthogonal discrete Bessel representations
J. Chem. Phys. **118**, 6697-99 (2003).
- [J64] **N. Lorente, M.-F.-G. Hédouin, R.-E. Palmer, M. Persson**
Chemisorption of benzene and STM dehydrogenation products on Cu(100)
Phys. Rev. B **68**, 155401-1-9 (2003).
- [J65] **F. Megi, M. Belkacem, M. A. Bouchene, E. Suraud, G. Zwicknagel**
On the importance of damping phenomena in clusters irradiated by intense laser fields
J. Phys. B **36**, 273-82 (2003).
- [J66] **F. E. Olsson, N. Lorente, M. Persson**
STM images of molecularly and atomically chemisorbed oxygen on silver
Surf. Sci. **522**, L27-35 (2003).

[J67] **J. I. Pascual, N. Lorente, H. Song, H. Conrad, H.-P. Rust**
Selectivity in vibrationally mediated single-molecule chemistry
Nature **423**, 525-528 (2003).

[J68] **J. G. Quattrucci, B. Jackson, D. Lemoine**
Eley-Rideal reactions of H atoms with Cl adsorbed on Au(111): quantum and quasiclassical studies
J. Chem. Phys. **118**, 2357-66 (2003).

[J69] **T. P. Rakitzis, P. C. Samartzis, R. L. Toomes, T. N. Kitsopoulos, A. Brown, G. Balint-Kurti, O. S. Vasyuntinskii, J. A. Beswick**
Spin polarized hydrogen atoms from molecular photodissociation
Science **300**, 1936-38 (2003).

[J70] **A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu, A. Bordenave-Montesquieu**
Kinetic energies of charged fragments resulting from multifragmentation and asymmetric fission of C₆₀ molecule in collisions with monocharged ions (2 to 130 keV)
J. Phys. B **36**, 1585-602 (2003).

[J71] **A. Rentenier, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu, A. Bordenave-Montesquieu**
Multifragmentation of C₆₀ induced by ⁴He²⁺ impact (E<60 keV/amu) and investigated by multicorrelation technique
NIM B **205**, 656-60 (2003).

[J72] **G. L. J. A. Rikken, C. Rizzo**
Magnetolectric anisotropy of the quantum vacuum, ,
Phys. Rev. A **67**, 015801/1-2 (2003).

[J73] **S. Zamith, V. Blanchet, B. Girard, J. Andersson, S. L. Sorensen, I. Hjelte, O. Björneholm, D. Gauyacq, N. Norin, J. Mauritson, A. L'Huillier**
The predissociation of highly excited states in acetylene by time-resolved photoelectron spectroscopy
J. Chem. Phys. **119**, 3763-73 (2003).

[J74] **J. P. Ziesel, N. C. Jones, D. Field, L. B. Madsen**
Reaction and scattering in cold electron collisions
Phys. Rev. Lett. **90**, 083201/ 1-4 ; erratum: **Phys. Rev. Lett.** **91**, 269904/1 (2003).

2004

[J75] **J. A. Beswick, A. G. Suits, O. Vasyutinskii, D. Zimmermann**
Possibility of a complete experiment in molecular dynamics
Adv. Chem. Phys. (Russie) **23**, 46-52 (2004).

[J76] **B. Chatel, J. Degert, B. Girard**
Role of quadratic and cubic spectral phases in ladder climbing with ultrashort pulses
Phys. Rev. A **70**, 053414/1-10 (2004).

[J77] **J. C. Delagnes, M. A. Bouchene**
Effect of a transient light-shift on the propagation of an ultrashort pulse in an atomic resonant atomic medium
Phys. Rev. A **69**, 063813/1-5 (2004).

[J78] **A. Dupays**

Isotopic effects in the muon transfer from $p\mu$ and $d\mu$ to heavier atoms

Phys. Rev. Lett. **93**, 043401/1-4 (2004).

[J79] **A. Dupays, B. Lepetit, J. A. Beswick, C. Rizzo, D. Bakalov**

Non-zero total angular momentum three-body dynamics using hyperspherical elliptic coordinates. Application to muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen and neon

Phys. Rev. A **69**, 62501/1-8 (2004).

[J80] **G. Durand, M.-C. Heitz, F. Spiegelman, C. Meier, R. Mitric, V. Bonacic-Koutecky, J. Pittner**

Theoretical absorption spectra and conformational changes in ground and excited states of Na_3F

J. Chem. Phys. **121**, 9898-905 (2004).

[J81] **D. Field, N. C. Jones, J. P. Ziesel**

Cold electron scattering in SF_6 and C_6F_6 : bound and virtual state channels

Phys. Rev. A **69**, 052716/1-11 (2004).

[J82] **T. Frederiksen, M. Brandbyge, N. Lorente, A.-P. Jauho**

Inelastic scattering and local heating in atomic gold wires

Phys. Rev. Lett. **93**, 256601/1-4 (2004).

[J83] **K. Fritioff, J. Sandström, P. Andersson, D. Hanstorp, F. Hellberg, R. Thomas, W. Geppert, M. Larsson, F. Osterdahl, G. F. Collins et al.**

Observation of an excited C_4^{2-} ion

J. Phys. B **37**, 2241-46 (2004).

[J84] **E. Gindensperger, C. Meier, J. A. Beswick**

Hybrid Quantum/Classical Dynamics Using Bohmian Trajectories

Adv. Quant. Chem. **47**, 331-46 (2004).

[J85] **M.-C. Heitz, G. Durand, F. Spiegelman, C. Meier, R. Mitric, V. Bonacic-Koutecky**

Ultrafast excited state dynamics of the Na_3F cluster: Quantum wave packet and classical trajectory calculations compared to experimental results

J. Chem. Phys. **121**, 9906-16 (2004).

[J86] **J. M. L'Hermite, V. Blanchet, A. Le Padellec, B. Lamory, P. Labastie**

Relaxation of photoexcited Na_3F

Eur. Phys. J. D **28**, 361-66 (2004).

[J87] **T. Lohmüller, V. Engel, J. A. Beswick, C. Meier**

Fractional Revivals in the ro-vibrational motion of I_2

J. Chem. Phys. **120**, 10442-49 (2004).

[J88] **N. Lorente**

Mode excitation induced by the scanning tunneling microscope

Appl. Phys. A **78**, 799-806 (2004).

[J89] **N. Lorente, J. I. Pascual**

Mode-specific strategy for controlling a single-molecule reaction

Phil. Trans. R. Soc. **362**, 1227 (2004).

[J90] **G. Martinet, S. Diaz-Tendero, M. Chabot, K. Wohrer, S. Della Negra, F. Mezdari, H. Hamrita, P. Désesquelles, A. Le Padellec, D. Gardès et al.**

Fragmentation of highly excited small neutral carbon clusters

Phys. Rev. Lett. **93**, 063401/1-4 (2004).

[J91] **C. Meier, J. A. Beswick**

Femtosecond pump-probe spectroscopy of I₂ in a dense rare gas environment: A mixed quantum/classical study of vibrational decoherence

J. Chem. Phys. **121**, 4550-58 (2004).

[J92] **C. Meier**

Mixed Quantum-classical treatment of vibrational decoherence

Phys. Rev. Lett. **93**, 173003/1-4 (2004).

[J93] **A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç, J. Vigué**

Anomalous cooling of the parallel velocity in seeded beams

Phys. Rev. A **70**, 030701R/1-4 (2004).

[J94] **A. Monmayrant, B. Chatel**

A new phase and amplitude high resolution pulse shaper

Rev. Sci. Instr. **75**, 2668-71 (2004).

[J95] **P. Moretto-Capelle, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu, A. Bordenave-Montesquieu**

Electron capture, ionization and fragmentation in collisions of singly charged ions with C₆₀

Physica Scripta T110, 325-31 (2004).

[J96] **B. D. Obreshkov, D. Bakalov, B. Lepetit, K. Szalewicz**

Collision quenching of antiprotonic helium atoms in gaseous helium

Phys. Rev. A **69**, 042701/1-6 (2004).

[J97] **C. O'Dwyer, G. Gay, B. Viaris de Lesegno, J. Weiner**

The nature of alkanethiol self-assembled monolayer adsorption on sputtered gold substrates

Langmuir **20**, 8172-82 (2004).

[J98] **F. Olsson, A.-G. Borisov, M. Persson, N. Lorente, A. Kasansky, J. P. Gauyacq**

Decay and dephasing of the Cu(100) image states induced by Cu adatoms

Phys. Rev. B **70**, 205417-1-5 (2004).

[J99] **R. Quidant, G. Lévêque, J.-C. Weeber, A. Dereux, C. Girard, J. Weiner**

Addressing and imaging microring resonators with optical evanescent light

Phys. Rev. B **69**, 081402-1-4 (2004).

[J100] **R. Quidant, G. Lévêque, J.-C. Weeber, A. Dereux, C. Girard, J. Weiner**

Frustrated energy transport through micro-waveguides decorated by gold nanoparticle chains

Europhys. Lett. **66**, 785-91 (2004).

[J101] **R. Quidant, G. Lévêque, J.-C. Weeber, A. Dereux, G. Colas des Francs, C. Girard, J. Weiner**

Modelling resonant coupling between microring resonators addressed by optical evanescent waves

Nanotechnology **15**, 1200-10 (2004).

- [J102] **J. Ramirez Serrano, W. De Graffenreid, E. Tiesinga, P. S. Julienne, J. Weiner**
Beam-loss spectroscopy of Cold Collisions in a Bright Sodium Beam
Phys. Rev. A **69**, 042708/1-8 (2004).
- [J103] **A. Rentenier, A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, D. Bordenave-Montesquieu**
Asymmetric fission and evaporation of C_{60}^{q+} ($q=2-4$) fullerene ions in collisions with protons. I- Proton results
J. Phys. B **37**, 2429-54 (2004).
- [J104] **A. Rentenier, A. Bordenave-Montesquieu, P. Moretto-Capelle, B. Bordenave-Montesquieu**
Asymmetric fission and evaporation of C_{60}^{q+} ($q=2-4$) fullerene ions in ion - C_{60} collisions. II- Dependence on collisional processes.
J. Phys. B **37**, 2455-65 (2004).
- [J105] **K. Rubin, M. Eminyan, F. Perales, R. Mathevet, K. Brodsky, B. Viaris de Lesegno, J. Reinhardt, M. Boustimi, J. Baudon, J. C. Karam, J. Robert**
Atom interferometer using two Stern-Gerlach magnets
Las-Phys-Lett. **1(4)**, 184-93 (2004).
- [J106] **M. F. Somers, D. Lemoine, G. J. Kroes**
Performance and application of a symmetry adapted pseudo spectral method for scattering of a diatomic molecule from a square surface: $H_2+Cu(111)$
Chem. Phys. **304**, 59-77 (2004).
- [J107] **E. M. Staicu-Casagrande, T. Nzeyimana, E. A. Naji, N. de Ruelle, B. Fabre, A. Le Padellec, X. Urbain**
Abstraction and insertion mechanisms in reactive collisions between H_2^+ or D_2^+ and O^-
Eur. Phys. J. D **31**, 469-75 (2004).
- [J108] **N. Vitanov, B. Girard**
Adiabatic excitation of rotational ladder by chirped laser pulses
Phys. Rev. A **69**, 033409/1-13 (2004).
- [J109] **W. Wohlleben, J. Degert, A. Monmayrant, B. Chatel, M. Motzkus, B. Girard**
Coherent transients as a highly sensitive probe for femtosecond pulse shaper
Appl. Phys. B **79**, 435-39 (2004).
- 2005**
- [J110] **D. Bakalov, J. A. Beswick, A. Dupays, C. Rizzo**
Proton Zemach radius and the hyperfine splitting of the ground state of muonic hydrogen
Can. J. Phys. **83**, 351-356 (2005).
- [J111] **F. Bielsa, R. Battesti, C. Robilliard, G. Bialolenker, G. Bailly, G. Tréneç, A. Rizzo, C. Rizzo** *Kerr effect of molecular oxygen at $\lambda = 1064$ nm : experiment and theory*
Eur. Phys. J. D, DOI : 10.1140/epjd/e2005-00243-1. (2005).
- [J112] **A. Bordenave-Montesquieu, D. Bordenave-Montesquieu, A. Rentenier, P. Moretto-Capelle**
Asymmetric fission and evaporation of C_{60}^{q+} ($q=2-4$) fullerene ions in ion - C_{60} collisions. III- Universal collisional behaviour for fission
J. Phys. B **38**, 1037-49 (2005).

- [J113] **F. Calvo, P. Labastie**
Computer simulation of the shape and "phase transitions" in finite systems
Eur. Phys. J. D **28**, S23-30 (2005).
- [J114] **A. Dupays, C. Robilliard, C. Rizzo, G.F. Bignani**
Observing Quantum Vacuum Lensing in a Neutron Star Binary System
Phys. Rev. Lett. **94**, 161101/1-4 (2005).
- [J115] **S. Gräfe, C. Meier, V. Engel**
Instantaneous dynamics and quantum control fields: principle and numerical applications
J. Chem. Phys. **122**, 184103-1-8 (2005).
- [J116] **A. Hidouche, A. C. Chami, Y. Boudouma, M. Boudjema, C. Bénazeth**
Specular reflection model study of the image effect in He $+a$:Si scattering at low energy
NIM B **230**, 178-184 (2005).
- [J117] **N. C. Jones, D. Field, J. P. Ziesel, T. A. Field**
Virtual state scattering with cold electrons: para-xylene and para-difluorobenzene
J. Chem. Phys. **122**, 074301-1-8 (2005).
- [J118] **A. Le Padellec**
Partial near threshold cross sections for the Associative Ionization to form CO^+ , NO^+ and O_2^+
Phys. Scripta **71**, 621-26 (2005).
- [J119] **G. Lévêque, R. Mathevet,**
Blazed atom grating,
J. Opt. Soc. Am. B **22**, 1554-1560 (2005)
- [J120] **N. Lorente, H. Ueba**
CO dynamics induced by tunnelling electrons: differences on Cu(110) and Ag(110)
Eur. Phys. J. D **35**, 341-48 (2005).
- [J121] **N. Lorente, R. Rurali, H. Tang**
Single-molecule manipulation and chemistry with the STM
J. Phys.: Condens. Matter **17**, S1049-74 (2005).
- [J122] **C. Meier, M.-C. Heitz**
Laser control of vibrational excitation in carboxy-hemoglobin: a quantum wave packet study
J. Chem. Phys. **123**, 044504-1-11 (2005).
- [J123] **F. Mezdari, K. Wohrer, M. Chabot, G. Martinet, S. Della Negra, P. Désesquelles, A. Le Padellec**
Ionisation cross sections of small cationic carbon clusters in high energy collisions with helium atoms and stability of multiply charged species
Phys. Rev. A **72**, 032707/1-7 (2005).
- [J124] **A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç, J. Vigué**
Lithium atom interferometer using laser diffraction: description and experiments
Eur. Phys. J. D **33**, 99-112 (2005).
- [J125] **A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç, J. Vigué**
Parallel temperatures in supersonic beams: Ultracooling of light atoms seeded in a heavier carrier gas
J. Chem. Phys. **122**, 094308-1-10 (2005).

[J126] **A. Monmayrant, A. Arbouet, B. Girard, B. Chatel, B. J. Whitaker, A. Barman, D. Kaplan**

Optimisation of NOPA output pulse shaping using an AOPDF with dispersion self-correction
Appl. Phys. B **81**, 177-180 (2005).

[J127] **M. Mützel, M. Müller, D. Haubrich, D. Meschede, C. O'Dwyer, G. Gay, B. Viaris de Lesegno, G. Ludolph, G. Georgiev, E. Osterschulze, J. Weiner**

The Atom Pencil : Serial Writing in the Sub-Micrometer Domain
Appl. Phys. B **80**, 941-944 (2005).

[J128] **S. Nave, D. Lemoine, M. F. Somers, S. M. Kingma, G. J. Kroes**

Six-dimensional quantum dynamics of scattering of ($v=0, j=0$) D2 and of ($v=1, j=0$) H2 from Cu(111)

J. Chem. Phys. **122**, 214709-1-9 (2005).

[J129] **N. Nieuwjaer, C. Bénazeth, P. Benoit-Cattin, P. Cafarelli, M. Richard-Viard**

Charge transfer in grazing scattering on clean and oxygen covered Cu(1 1 0) surfaces: velocity effects

NIM B **230**, 317-322 (2005).

[J130] **C. O'Dwyer, G. Gay, B. Viaris de Lesegno, J. Weiner, A. Camposeo, F. Tantussi, F. Fuso, M. Allegrini, E. Arimondo**

Atomic nanolithography patterning of submicron features: writing an organic self-assembled monolayer with cold, bright Cs atom beams

Nanotechnology **16**, 1536-41 (2005).

[J131] **C. O'Dwyer, G. Gay, B. Viaris de Lesegno, J. Weiner, K. Ludolph, D. Albert, E. Osterschulze**

Writing self-assembled monolayers with Cs: optimization of atomic nanolithography imaging using self-assembled monolayers on gold substrates

J. Appl. Phys. **97**, 114309/1-11 (2005).

[J132] **C. Rizzo, G. L. J. A. Rikken**

Magneto-Electro-Optical properties of the Quantum Vacuum and Lorentz Invariance
Physica Scripta **71**, C5-8 (2005).

[J133] **O. Roncero, A. Buchachenko, B. Lepetit**

Competition between adiabatic and non adiabatic fragmentation pathways in the unimolecular decay of ArI2(B) van der Waals complex

J. Chem. Phys. **122** 034303-1-12 (2005).

[J134] **R. Rurali, N. Lorente**

Metallic and semimetallic Silicon <110> nanowires

Phys. Rev. Lett. **94**, 026805/1-4 (2005).

[J135] **R. Rurali, N. Lorente**

On the properties of surface reconstructed silicon nanowires

Nanotechnology **16**, S250 -3 (2005).

[J136] **T. Schlathölter, R. Hoekstra, S. Zamith, Y. Ni, H. G. Muller, M. J. J. Vrakking**

Response of polyatomic molecules to ultrastrong laser- and ion-induced fields

Phys. Rev. Lett. **94**, 23300/1-4 (2005).

- [J137] **X. Sha, B. Jackson, D. Lemoine, B. Lepetit**
Quantum studies of H atom trapping on a graphite surface
J. Chem. Phys. **122**, 014709-1-8 (2005).
- [J138] **H. Ueba, T. Mii, N. Lorente, B. N. J. Persson**
Adsorbate motions induced by inelastic-tunneling current: theoretical scenarios of two-electron processes
J. Chem. Phys. **123**, 084707/1-8 (2005).
- [J139] **S. Zamith, Z. Ansari, F. Lepine, M. J. J. Vrakking**
Single-shot measurement of revival structures in femtosecond laser-induced alignment of molecules
Opt. Lett. **30**, 2326-28 (2005).
- [J140] **J. P. Ziesel, L. B. Madsen, N. C. Jones, D. Field**
Electron attachment cross-sections in CCl₄ and SF₆ from total scattering data
J. Chem. Phys. **122**, 024309 (2005).
- [J141] **A. Dupays, C. Rizzo, M. Roncadelli, G. F. Bignami**
Looking for Light Pseudoscalar Bosons in Gamma-Rays from Binary Pulsars
Phys. Rev. Lett. (accepté)
- [J142] **G. Gay, B. Viaris de Lesegno, R. Mathevet, C. O'Dwyer, J. Weiner**
Atomic fluorescence mapping of spatial optical intensity distributions issuing from nanostructured slits, milled into subwavelength metallic layers
Appl. Phys. B (accepté).
- [J143] **A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç and J. Vigué**
Atom interferometry measurement of the electric polarizability of lithium
Eur. Phys. J. D. (accepté)
- [J144] **A. Monmayrant, B. Chatel, B. Girard**
Femtosecond pulse shape reconstruction from coherent transient measurements
Opt. Lett. (accepté).
- [J145] **A. Arbouet, B. Girard, B. Chatel, R. Freydier, F. Poitrasson, B. Dupré, F. Candaudap**
Effect of pulse duration on chemical analysis of glass with LA-ICP-MS
Applied Physics A-Materials Science & Processing (soumis)
- [J146] **J. C. Delagnes, A. Monmayrant, P. Zahariev, A. Arbouet, B. Chatel, B. Girard, M. A. Bouchene**
Compensation of resonant dispersion in atomic medium using a pulse shaper
Appl. Phys. B (soumis).
- [J147] **H. Katsuki, H. Chiba, B. Girard, C. Meier, K. Ohmori**
Observing picometric quantum interference structures at the half revival time
Phys. Rev. Lett. (soumis).
- [J148] **W. Merkel, M. Bienert, O. Crasser, F. Haug, E. Lutz, H. Mack, M. Freyberger, W. P. Schleich, I. S. Averbukh, B. Girard, H. Maier, G. G. Paulus**
Chirped pulses, Gauss sums and the factorization of numbers
International Journal of Modern Physics B (soumis).

[J149] **A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner, G. Tréneç, J. Vigué**
Measurement of the electric polarizability of lithium by atom interferometry
Phys. Rev. Lett. (soumis)

[J150] **A. Monmayrant, B. Chatel, B. Girard**
Atomic spirograph: measurement of the excited state wave function using coherent transients
Phys. Rev. Lett. (soumis).

11.2. Conférences Invitées

11.2.1. dans les congrès internationaux

2002

[I1] **J. Degert*, S. Stock, B. Girard, B. Chatel, W. Wohlleben, M. Motzkus**
Manipulation of Coherent Transients with shaped ultrashort pulses
 COCOMO network meeting, Sofia (Bulgarie), 5-6 apr 2002, (2002).

[I2] **R. Delhulle, A. Miffre, L. Jozefowski, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué***
First experiments with a Mach-Zehnder atom interferometer
 Colloque PAAT, Cracovie, 31/05-02/06/2002, (2002).

[I3] **B. Girard*, B. Chatel, J. Degert, C. Meier**
Coherent Control in Atoms and Molecules : Application to information storage ?
 Quantware, Toulouse, Juillet 2002, (2002).

[I4] **N. Lorente**
Total energy methods in Computational Condensed Matter
 Psik 2000 workshop, La Laguna, Tenerife, Spain., Janvier 2002 (2002).

[I5] **C. Meier**
Mixing quantum ad classical mechanics: The MQCB method and its applications
 CECAM-workshop: Currents, trajectories and their applications in Quantum dynamics Lyon, septembre 2002 (2002).

[I6] **C. Meier**
Mixing quantum and classical mechanics using Bohmian trajectories
 ITAMP workshop on Computational Approaches to Time-Dependent Quantum Dynamics, Harvard mai 2002, (2002).

[I7] **P. Moretto-Capelle*, D. Bordenave-Montesquieu, A. Rentenier, A. Bordenave-Montesquieu**
Multi-fragmentation of C60 induced by low charged ions
 3rd Annual LEIF Meeting, Igls/Innsbruck, Autriche (2002).

[I8] **J. Weiner**
Cool Interactions 2002, Workshop and Training School Interactions in Ultracold Gases from Atoms to Molecules, Internationales Wissenschaftsforum, Heidelberg 9-13 septembre 2002 (2002).

[I9] **J. Weiner**

International Conference on "Current Developments in Atomic, Molecular and Chemical Physics with applications", Delhi University, Delhi, India, 20-22 March 2002, (2002).

2003

[I10] **J. A. Beswick**

Non adiabatic transitions in muon transfer collisions, Spectroscopy and dynamics on multiple surfaces

Telluride, USA, août 2003, (2003).

[I11] **A. Bordenave-Montesquieu*, P. Moretto-Capelle, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu**

Electron spectroscopy and fragmentation of C60 in collisions with monocharged ions

4th Annual LEIF Meeting,, Belfast, Irlande, (2003).

[I12] **B. Chatel*, J. Degert, A. Monmayrant, J.-C. Delagnes, S. Stock, P. Zahariev, B. Girard, M. A. Bouchene**

Coherent Control in Atoms with ultrashort chirped and shaped laser pulses

COCOMO network meeting, Heraklion (Crète), 9-10 oct 2003, (2003).

[I13] **B. Girard*, B. Chatel, A. Monmayrant, M. A. Bouchene, J.-C. Delagnes**

Coherent Control in Atoms with ultrashort chirped and shaped laser pulses

Quebec International Symposium on Ultrafast Laser Science 2: interaction and propagation, Quebec City, 27-29 sept 2003, (2003).

[I14] **B. Girard*, B. Chatel, A. Monmayrant, M. A. Bouchene, J.-C. Delagnes**

Coherent Control in Atoms with ultrashort chirped and shaped laser pulses

Optimal control of Quantum dynamics: Theory and experiment, Ringberg Castle (Allemagne), 7-10 dec 2003, (2003).

[I15] **B. Girard*, J. Degert, S. Stock, B. Chatel, W. Wohlleben, M. Motzkus**

Coherent Control in Atoms and Molecules with ultrashort chirped and shaped laser pulses

FRISNO 7, Les Houches, 17-20 feb 2003, (2003).

[I16] **B. Girard*, J. Degert, S. Zamith, S. Stock, B. Chatel, M. A. Bouchene, V. Blanchet, W. Wohlleben, M. Motzkus**

Coherent Control in Atoms and Molecules with ultrashort chirped and shaped laser pulses

Analysis and control of ultrafast photoinduced reactions, Berlin, 20-22 march 2003, (2003).

[I17] **B. Girard*, J. Degert, S. Zamith, S. Stock, B. Chatel, M. A. Bouchene, V. Blanchet, W. Wohlleben, M. Motzkus**

Coherent Control in Atoms and Molecules with ultrashort chirped and shaped laser pulses

Manipulation of electrons, atoms and molecules (IOP symposium), Nottingham, 8th april 2003, (2003).

[I18] **P. Labastie**

Phase Transitions in Free Clusters

Condensed Matter Theory, Toulouse, France, sep. 15-20 2003, (2003).

- [I19] **N. Lorente**
Mode excitation and reaction pathways induced by the scanning tunneling microscope
13th International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, Prague, Czech Republic, 30 juillet–2 août 2003, (2003).
- [I20] **N. Lorente**
Mode excitation and reaction pathways induced by the scanning tunneling microscope
CECAM-ESF/Psi-k Workshop on Electronic Transport in Molecular Systems CECAM, Lyon, France, 2-5 Juin 2003, (2003).
- [I21] **N. Lorente**
Mode excitation and reaction pathways induced by the scanning tunneling microscope
Hauptvortrag dans la réunion de printemps de la société allemande de physique, DPG, Dresden, Allemagne, 24-28 mars 2003, (2003).
- [I22] **N. Lorente**
Mode selective chemistry induced by tunneling electrons
Condensed Matter Theory conference, Toulouse, 22–26 septembre 2003, (2003).
- [I23] **N. Lorente**
Processus inélastiques induits par le microscope à effet tunnel : spectroscopie vibrationnelle et réactivité contrôlée
Académie de Sciences de l'Institut de France et Académie des Sciences de la Société Royale du Canada, Colloque conjoint Molécules et Nanoscience, La Grande Motte, France, 6-9 avril 2003, (2003).
- [I24] **N. Lorente**
Scanning tunneling microscope theory: elastic and inelastic currents
Winter school on scanning probe microscopy and spectroscopy, Delmenhorst, Allemagne, 4-7 février 2003, (2003).
- [I25] **C. Meier**
Mixing quantum and classical mechanics: The MQCB method and its applications
International Summer school on electron transport in nanostructures, Toulouse, mai 2003, (2003).
- [I26] **A. Miffre, R. Delhuille, M. Büchner, C. Robilliard, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué***
Atom interferometry on a thermal lithium beam
Symposium "Cold atoms and quantum information" Collège de France, 7 février 2003, (2003).
- [I27] **P. Moretto-Capelle*, A. Rentenier, D. Bordenave-Montesquieu, A. Bordenave-Montesquieu**
Electron capture, ionization and fragmentation in collisions of singly-charged ions with C60
23th ICPEAC Stockholm, Suede, (2003).
- [I28] **J. Weiner**
Advanced School on Time and Frequency Metrology,, São Paulo, Brazil, 5-15 octobre 2003, (2003).
- [I29] **W. Wohlleben*, J. Degert, B. Chatel, B. Girard**
A time domain Fresnel lens with coherent control
Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG), Hannover, Germany, (2003).

[I30] **J. P. Ziesel***, **D. Field**, **N. C. Jones**, **S. V. Hoffmann**, **S. L. Lunt**, **T. A. Field**, **N. J. Mason**

Total scattering of cold electrons by molecules

EMS-03 (International Symposium on Low Energy Electron-Molecule Collisions and Swarms), Colloque satellite du XXIII ICPEAC, Prague, (2003).

2004

[I31] **V. Blanchet**

Time resolved dynamics in polyatomic molecules with VUV pulses

Needs and Opportunity for Future Advanced Light Sources-Euresco Conference, Propriano, (2004).

[I32] **V. Blanchet**

Time resolved dynamics in polyatomic molecules with VUV pulses

ACS's 227th National Meeting, Anaheim, USA, (2004).

[I33] **B. Chatel**

Non linear mixing and shaping from NIR to UV : Towards the control of molecular dynamics

PICNIC network meeting, Paris, (2004).

[I34] **J. A. Davis***, **J. J. Wathen**, **V. Blanchet**, **R. T. Phillips**

Time-resolved degenerate four-wave mixing (TR-DFWM) of magneto-excitons in GaAs/AlGaAs single quantum wells (SQW)

The 20th General Conference of the Condensed Matter Division European Physical Society, Prague, (2004).

[I35] **B. Girard***, **B. Chatel**, **A. Monmayrant**

Coherent control in atoms and molecules with ultrashort laser pulses

Symposium on Control of Molecules and Clusters in Intense Laser Fields, Tokyo University, July 26, 2004, (2004).

[I36] **B. Girard***, **B. Chatel**, **A. Monmayrant**

Coherent control in atoms and molecules with ultrashort laser pulses

Physical Chemistry Colloquium on Ultrafast and Intense Field Phenomena, Tohoku University, Sendai, August 2-3, 2004, (2004).

[I37] **B. Girard***, **B. Chatel**, **A. Monmayrant**

Coherent control with shaped ultrashort laser pulses in atoms and molecules

"Frontiers of Nonlinear Physics", Nizhny Novgorod, Russia, July 5-12, 2004, (2004).

[I38] **D. Lemoine**

Theoretical dynamics of recombinative collisions of gas phase atoms with atoms adsorbed on surfaces

European Conference "Atomic and Molecular Physics" ECAMP VIII, Rennes, 6 au 10 Juillet 2004, (2004).

[I39] **N. Lorente**

Inducing controlled atomic dynamics by an electron current

Workshop on Surface and Nano Science ISSP, Tokyo, Japan, 2-4 august 2004, (2004).

[I40] **N. Lorente**

Inducing controlled atomic dynamics by an electron current.

Workshop on Molecule-surface interactions, San Sebastian, Espagne, 8–11 septembre 2004 (2004).

[I41] **C. Meier**

Femtosecond Wave packet dynamics and vibrational decoherence: a mixed quantum-classical study of I_2 in a dense rare gas environment

Réunion du SFB : « Analysis and Control of Ultrafast Photoinduced processes", Berlin, Allemagne, Octobre 2004, (2004).

[I42] **P. Moretto-Capelle***, **A. Rentenier**, **A. Bordenave-Montesquieu**, **D. Bordenave-Montesquieu**

Secondary electron emission in proton-uracil collision : preliminary results

Radiation damage in biomolecular systems, Lyon, France, (2004).

[I43] **S. Stock**, **B. Chatel***, **B. Girard**

Coherent Control in Atoms with ultrashort laser pulses and application to Polychromatic Laser Guided Star

Workshop on Polychromatic Laser Guided Star, Ste-Croix (Ain), 3-4 juin 2004, (2004).

[I44] **J. Weiner**

Workshop on Mixtures of Ultracold Atoms, satellite of ICAP XIX, International Conference on Atomic Physics,, São Pedro, Brazil, 19-23 juillet 2004, (2004).

[I45] **J. Weiner**

NFO-8, Eighth International Conference on Near-field Nano Optics and Related Techniques, Séoul, Corée, 5-9 septembre 2004, (2004).

[I46] **J. Weiner**

LAM-7, Seventh International Workshop on Physics and Modern Applications of Lasers, Douala, Cameroon, 6-10 décembre 2004, (2004).

2005

[I47] **J. A. Beswick**

Polarization of photofragments' fluorescence: the semiclassical treatment.

CCP6 on Vector correlation and alignment in chemistry, Bristol,, 20-23 juillet 2005, (2005).

[I48] **B. Chatel***, **A. Monmayrant**, **B. Girard**

The atomic spirograph: atomic wave function and laser pulse shape measurements from coherent transients

ICOLS, Aviemore, United Kingdom, June 20-24, 2005, (2005).

[I49] **B. Chatel***, **A. Monmayrant**, **B. Girard**

Control of Coherent Transients using shaped pulses

CLEO (EQEC) Europe, Munich, June 13-16, 2005, (2005).

[I50] **J. A. Davis***, **V. Blanchet**, **J. J. Wathen**, **R. T. Phillips**, **A. I. Tartakovskii**, **M. S. Skolnick**

Time resolved of Spin coherence of excitons in a GaAs/AlGaAs quantum dots

OECS, Southampton, (2005).

- [I51] **D. Field, N. C. Jones, L. B. Madsen, J. P. Ziesel, T. A. Field**
Cold association of electrons and molecules
PARYS workshop (Ultracold Plasmas and Rydberg Systems), Gif-sur-Yvette, (2005).
- [I52] **D. Field, N. C. Jones, J. P. Ziesel**
Cold electrons in plasmas and molecular interactions
SAPP XV (15th Symposium of Plasma Processes), Podbanské, Slovaquie, (2005).
- [I53] **D. Lemoine**
Resonance states in the chemisorption of hydrogen atoms on the graphite (0001) surface
13th Workshop “Quantum Atomic and Molecular Tunneling in Solids and other Condensed Phases” QAMTS, Saint Jacques de Compostelle, Espagne, 27 au 31 Juillet 2005, (2005).
- [I54] **B. Lepetit**
Hyperspherical approach to charge transfer and reaction dynamics
Dresde, novembre 2005, (2005).
- [I55] **B. Lepetit**
Muon transfer between hydrogen and heavier atoms
QED, Quantum Vacuum and the search for New Forces,, Les Houches, 5-9 juin 2005, (2005).
- [I56] **N. Lorente**
Total-energy calculations as the basis of electronic transport calculations: the need of self-consistent electron-vibration couplings
CECAM; Workshop on State of the art developments and perspectives of real-space electronic structure techniques in condensed matter and molecular physics, Lyon, 20 – 24 juin 2005, (2005).
- [I57] **C. Meier**
Hybrid quantum/classical dynamics using quantum trajectories
Workshop on: « Molecular dynamics : Chemistry and Mathematics » of the DFG
Schwerpunktprogramm: « Multiscale problems », Blaubeuren, Allemagne, juin 2005, (2005).
- [I58] **C. Meier**
A mixed quantum-classical study of vibrational decoherence
Quantum dynamics of complex molecular systems University of Florida Research Center,
Paris, mai 2005, (2005).
- [I59] **A. Miffre, M. Jacquy, M. Büchner*, G. Trénec, J. Vigué**
Interférométrie atomique avec le lithium aux énergies thermiques
Congrès Général de la Société Française de Physique et de Belgian Physical Society, Lille, 29
Août-2 Septembre 2005, (2005).
- [I60] **C. Rizzo**
Probing Dark Matter and vacuum Energy by light Propagation in a Magnetic Field
Astroparticle Meeting: dark energies, Dark matters, IHP, Paris, 28-29 Avril 2005, (2005).
- [I61] **C. Robilliard**
The BMV project : status of the experiment
QED2005, Les Houches, France, (2005).

[I62] **J. Weiner**

FRISNO-8, French-Israeli Symposium on Nonlinear and Quantum Optics, Ein Bokek, Israel, février 20-27 2005, (2005).

[I63] **J. Weiner**

CAMS-1, Conference on Atoms and Molecules near Surfaces, Heidelberg, Germany, 4-8 avril 2005, (2005).

11.3.2. dans les congrès nationaux

2002

[I64] **V. Blanchet**

Dynamiques ultrarapides étudiées par spectroscopie de photoélectrons résolue en temps
Colloque PAMO/JSM, Bourges, juillet 2002, (2002).

[I65] **V. Blanchet*, B. Girard, et al**

Dynamique femtoseconde dans les Molécules et agrégats par excitation VUV
Journée Harmoniques VUV, Orsay, mars 2002, (2002).

[I66] **J. Degert, S. Stock*, B. Girard, B. Chatel**

Interferences in Quantum Ladder Climbing and Laser Guided Artificial Star
Ecole d'été sur le contrôle cohérent, Cargèse, (2002).

[I67] **R. Delhuille, A. Miffre, L. Jozefowski, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué**

Current Developments in Atomic, Molecular and Chemical Physics with applications
Colloque PAMO, Bourges, juillet 2002, (2002).

[I68] **R. Delhuille*, A. Miffre, L. Jozefowski, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué**

Interférométrie atomique avec l'atome de lithium
Colloque PAMO 2002, Bourges, juillet 2002, (2002).

[I69] **B. Girard*, S. Zamith, J. Degert, S. Stock, V. Blanchet, B. Chatel, M. A. Bouchene**
Cohérent Control in Atomic and Molecular Systems

Atomes, Molécules et Lumière – Colloque en l'honneur de Raymond Vetter, Gif sur Yvette, 12-13 nov 2002, (2002).

[I70] **C. Meier**

Dynamique femtoseconde et décohérence vibrationnelle de I₂ dans un gaz rare à haute pression

8ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones, Strasbourg, septembre 2002, (2002).

[I71] **C. Meier**

Dynamique femtoseconde et décohérence vibrationnelle de I₂ dans un gaz rare à haute pression

8ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones, Strasbourg, septembre 2002, (2002).

[I72] **C. Meier**

Mécanismes de décohérence quantique: I₂ dans un gaz rare à haute pression
GDR Femtochimie en Solution, Pont-à-Mousson, décembre 2002 (2002).

[I73] **C. Meier**
Une nouvelle méthode mixte quantique/classique
PAMO, Bourges, juillet 2002, (2002).

2003

[I74] **M. A. Bouchene**
Propagation d'impulsions femtosecondes dans un milieu optiquement dense : observation et contrôle
Coloq 8, Toulouse, Septembre 2003, (2003).

[I75] **B. Chatel*, J. Degert, A. Monmayrant, J. C. Delagnes, S. Stock, P. Zahariev, B. Girard, M. A. Bouchene**
Mise en forme et boucle ouverte: un mariage heureux
6^{èmes} Journées de Phénomènes Ultrarapides, Strasbourg, 3-5 septembre, (2003).

[I76] **N. Lorente**
Processus inélastiques induits par le microscope à effet tunnel : spectroscopie vibrationnelle et réactivité contrôlée
Atelier de printemps ``Physique des Surface et Nanostructures'', Cargèse, 25-30 mai 2003, (2003).

[I77] **C. Meier**
Dynamique ultrarapide de petits agrégats de fluorure de sodium excités par des impulsions femtosecondes
JPU, Mittelwihr, Octobre 2003, (2003).

2004

[I78] **V. Blanchet**
Time resolved dynamics in polyatomic molecules with VUV pulses
Applications des sources accordables VUV-X fs combinant accélérateurs et lasers :slicing sur SOLEIL et la proposition ARC-EN-CIEL, Orsay, (2004).

[I79] **B. Chatel**
Sources ultra-courtes accordables : État de l'art
FEMTO 2004, Porquerolles, (2004).

[I80] **B. Girard*, S. Stock, S. Zamith, J. Degert, A. Monmayrant, J. C. Delagnes, B. Chatel, V. Blanchet, M. A. Bouchene**
Contrôle cohérent avec des impulsions laser ultracourtes mises en forme
Symposium « Manipulations d'atomes et de photons », dédié à J. Brosse, Collège de France, Paris, 16 janvier 2004, (2004).

[I81] **B. Girard**
Le contrôle cohérent
FEMTO2004, Ile de Porquerolles, 21-24 Sept. 2004, (2004).

[I82] **D. Lemoine**

Notions sur les approches de paquet d'ondes quantiques

2nde journée des théoriciens de la Fédération LUMAT., Orsay, 8 Mars 2004, (2004).

[I83] **A. Miffre, M. Jacquey, M. Büchner, G. Tréneç, J. Vigué***

Atom interferometry

ECAMP/PAMO, Rennes, Juillet 2004, (2004).

[I84] **A. Miffre, M. Jacquey, M. Büchner, G. Tréneç, J. Vigué***

Interférences atomiques de contraste élevé avec le lithium aux énergies thermiques

Journées du GREX 2004, Nice, 27-29 Octobre 2004, (2004).

[I85] **C. Rizzo**

La biréfringence magnétique du vide : théorie et expérience

COLOQ8, Toulouse, Septembre 2004, (2004).

2005

[I86] **D. Lemoine**

Dynamique quantique des interactions hydrogène-surface

Colloque interdisciplinaire "Interaction de l'hydrogène avec des surfaces", Observatoire de Paris, 13 et 14 Juin 2005, (2005).

[I87] **C. Meier**

Contrôle quantique par la dynamique quantique instantanée : principes et applications

Journée thématique : "Contrôle et dynamique sous champs laser", Paris, mars 2005, (2005).

[I88] **C. Meier**

Spectroscopie femtoseconde

GDR « Agrégation, Fragmentation et Thermodynamique des Systèmes complexes », Porquerolles, mai 2005, (2005).

[I89] **A. Miffre, M. Jacquey, M. Büchner, G. Tréneç, J. Vigué***

Interférométrie atomique avec le lithium

COLOQ9, Dijon, 7-9 Septembre 2005, (2005).

11.3. Les communications avec actes

2002

[P1] **S. Askenazy, J. Billette, P. Dupré, P. Ganau, J. Mackowski, J. Marquez, L. Pinard, O. Portugall, D. Ricard, G. Rikken, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué**

Mesure de la biréfringence magnétique du vide : le projet BMV

COLOQ 7 (Rennes, 2001), A. Aspect, M. Brunel, and O. Emile ed., **J. Phys. IV France**, Vol. 12, pp. Pr5-145-46 (2002).

[P2] **J. Degert, C. Meier, B. de Beauvoir, M. J. J. Vrakking, B. Girard**

Spectroscopie de photofragments résolue en temps. Manipulation d'interférences et codage d'information dans une molécule en cours de prédissociation

COLOQ'7 (Rennes, 2001), A. Aspect, M. Brunel, and O. Emile ed., **J. Phys. IV France**, Vol. 12, pp. Pr5-253-54 (2002).

[P3] **R. Delhuille, C. Champenois, M. Büchner, L. Jozefowski, B. Aymes, A. Miffre, E. Lavalette, R. Sares, B. Viaris de Lesegno, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué**
Interféromètre de Mach-Zehnder atomique fonctionnant avec le lithium : premiers signaux
COLOQ 7 (Rennes, 2001), A. Aspect, M. Brunel, and O. Emile eds, **J. Phys. IV France**, Vol. 12, pp. Pr5-131-32 (2002).

[P4] **R. Delhuille, A. Miffre, B. Viaris de Lesegno, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué**
Fringe contrast in Mach-Zehnder atom interferometers
Conference on Photons, Atoms and all that (Cracovie, Pologne), **Acta Physica Polonica B**, Vol. 33, pp. 2157-71 (2002).

[P5] **D. Field, N. C. Jones, J. P. Ziesel**
Time delays and cold collisions
International Meeting on Electron Scattering from Atoms, Nuclei, Molecules and Bulk Matter (Cambridge), C. T. Whetan and N. J. Mason ed., **Kluwer Academic/Plenum NY**, (2002).

[P6] **D. Field, S. L. Lunt, N. C. Jones, J. P. Ziesel**
Cold collisions of electrons with molecules: virtual state scattering in CO₂
Photonic, Electronics and Atomic Collisions (XXII ICPEAC) (Santa Fe, USA), D. Datz and al. eds, **Rinton Press**, pp. 2001 (2002).

[P7] **S. Zamith, V. Blanchet, B. Girard, J. Norin, J. Mauritsson, A. L'Huillier, J. Andersson, S. Sorensen, I. Hjelte, O. Bjorneholm, D. Gauyacq**
Predissociation dynamics of acetylene Rydberg states
Femtochemistry and Femtobiology: Ultrafast Dynamics in Molecular Science (Singapore), A. Douhal and J. Santamaria ed., **World Scientific**, pp. 43-53 (2002).

[P8] **S. Zamith, J. Degert, S. Stock, B. de Beauvoir, V. Blanchet, M. A. Bouchène, B. Girard**
Effect of Coherent Transients on a Pump-Probe Time Resolved Signal
Femtochemistry and Femtobiology: Ultrafast Dynamics in Molecular Science (Singapore), A. Douhal and J. Santamaria ed., **World Scientific**, pp. 559-67 (2002).

[P9] **S. Zamith, J. Degert, S. Stock, B. de Beauvoir, V. Blanchet, B. Girard**
Observation de transitoires cohérents excités par une impulsion ultracourte à dérive de fréquence
COLOQ'7 (Rennes, 2003), A. Aspect, M. Brunel, and O. ZEmile ed., **J. Phys. IV France**, Vol. 12, pp. 251-52 (2002).

2004

[P10] **V. Blanchet, J. M. L'Hermite, A. Le Padellec, B. Lamory, P. Labastie**
Vibrational relaxation of photoexcited Na₃F
Femtochemistry and Femtobiology: Ultrafast Events in Molecular Science, M. M. Martin and J. T. Hynes ed., **Elsevier**, pp. 57-61 (2004).

[P11] **M. A. Bouchene, J. C. Delagnes, M. Jacquy, S. Bonhommeau, P. Zahariev, A. Monmayrant, B. Chatel, B. Girard**

Propagation of ultrashort pulses in resonant atomic systems: Observation and control

COLOQ8 (Toulouse, 2003), A. Aspect, J. Vigué, and B. Girard ed., **J. Phys. IV France**, Vol. 119, pp. 13-18 (2004).

[P12] **M. Büchner, R. Delhuile, C. Robilliard, J. Vigué, A. Miffre, C. Champenois**

Diffraction phases in atom interferometry

COLOQ8 (Toulouse, 2003), A. Aspect, J. Vigué, and B. Girard ed., **J. Phys. IV France**, Vol. 119, pp. 139-40 (2004).

[P13] **B. Chatel, J. Degert, S. Stock, B. Girard**

Interférences entre chemins quantiques dans une transition en échelons

COLOQ'8 (Toulouse, 2003), A. Aspect, J. Vigué, and B. Girard ed., **J. Phys. IV France**, Vol. 119, pp. 151-152 (2004).

[P14] **B. Chatel, J. Degert, S. Stock, B. Girard**

Observation and manipulation of quantum interferences in ladder climbing

Ultrafast Phenomena XIV (Niigata), T. Kobayashi ed., pp. 861-63 (2004).

[P15] **D. Kaplan, P. Tournois, B. Chatel, A. Monmayrant**

Tunable wavelength pulse shaping of visible NOPA outputs with an Acousto-Optic Programmable Dispersive Filter

Ultrafast Phenomena XIV (Niigata), T. Kobayashi ed., **Springer**, pp. 70-72 (2004).

[P16] **A. Miffre, M. Jacquy, R. Delhuile, M. Büchner, C. Rizzo, G. Tréneç, J. Vigué**

An atom interferometer using thermal lithium atoms

COLOQ8 (Toulouse, 2003), A. Aspect, J. Vigué, and B. Girard ed., **J. Phys. IV**, Vol. 119, pp. 233-34 (2004).

[P17] **A. Monmayrant, B. Chatel, J. Degert, B. Girard**

Manipulation de transitoires cohérents avec des impulsions mises en forme

COLOQ'8 (Toulouse, 2003), A. Aspect, J. Vigué, and B. Girard ed., **J. Phys. IV**, Vol. 119, pp. 239-240 (2004).

[P18] **A. Monmayrant, B. Chatel, B. Girard**

Towards electric field reconstruction using coherent transients in a two-level system

Ultrafast Phenomena XIV (Niigata), T. Kobayashi ed., **Springer**, pp. 91-93 (2004).

[P19] **C. Rizzo, C. Robilliard, G. Tréneç**

La biréfringence magnétique du vide : théorie et expériences

COLOQ'8 (Toulouse, 2003), **J. Phys. IV**, Vol. 119, pp. 97 (2004).

2005

[P20] **M. Chabot, F. Mezdari, G. Martinet, K. Wohrer-Béroff, S. Della Negra, P. Désesquelles, H. Hamrita, A. Le Padellec, L. Montagnon, S. Diaz-Tendero, M. Alcamí, P. A. Hervieux, F. Martin**

Fragmentation of small carbon clusters

ICPEAC 2005 - XXIV International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, World scientific, (2005)

[P21] **B. Chatel, A. Monmayrant, B. Girard**

The atomic spirograph: atomic wave function and laser pulse shape measurements from coherent transients

ICOLS05 (Aviemore), (2005).

[P22] **G. Gay, B. Viaris de Lesegno, R. Mathevet, H. J. Lezec, J. Weiner**

Mapping of angular and spatial optical intensity distributions issuing from nanostructured slits, milled into subwavelength metallic layers), **Journal of Physics: Conference Series**, Vol. 19, pp. 102-108 (2005).

[P23] **A. Monmayrant, A. Arbouet, B. Girard, B. Chatel, B. J. Whitaker, A. Barman, D. Kaplan**

Optimisation of NOPA output pulse shaping using an AOPDF with dispersion self-correction **CLEO (QELS)** (Baltimore), **OSA**, (2005).

[P24] **A. Monmayrant, B. Girard, B. Chatel**

Electric field reconstruction using coherent transients in a two-level system **CLEO (QELS)** (Baltimore), **OSA**, (2005).

[P25] **C. O'Dwyer, G. Gay, B. Viaris de Lesegno, J. Weiner, M. Mützel, D. Haubrich, D. Meschede, G. Ludolph, G. Georgiev, E. Oesterschulze**

Advancing atomic nanolithography: cold atomic Cs beam exposure of alkanethiol self assembled monolayers †

Journal of Physics: Conference Series 19, 109-117 (2005).

11.4. Les autres publications : Livres, Sections de livres

2002

[B1] **T. Durt, J. Baudon, R. Mathevet, J. Robert, B. Viaris de Lesegno,**

Memory effects in atomic interferometry: a negative result

dans ***Probing-the-Structure-of-Quantum-Mechanics.-Nonlinearity,-Nonlocality,-Computation,-Axiomatics***, édité par D. Aerts, M. Czachor, and T. Durt (World Scientific (Singapour), 2002), pp. 165-204.

2003

[B2] **N. Djuric, W. Zong, C. H. Greene, G. H. Dunn, A. Al Khalili, H. Danared, A. M. Derkach, M. Larsson, A. Le Padellec, A. Neau, S. Rosen, W. Shi, L. Viktor, M. Af Ugglas**

Ionic fragment production in dissociative electron-molecular ion collisions

dans ***Dissociative Recombination : Theory, Experiment and Applications IV***, édité par M. Larsson, J. B. A. Mitchell, I. Schneider (World Scientific, 2003), pp. 56-68.

[B3] **A. Le Padellec**

Studies of electron collisions with CN^+ , CN^- and HNC^+/HNC^+

dans ***Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons***, édité par S. L. Guberman (Kluwer Academic / Plenum Publishers, 2003), pp. 109-25.

[B4] **A. Le Padellec, F. Rabilloud, D. J. Pegg, K. Andersson, D. Hanstorp, A. Neau, M. Larsson, F. Hellberg, R. Thomas**

Electron collisions with C_4^- : detachment process and resonant structure

dans *Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons*, édité par S. L. Guberman (Kluwer Academic / Plenum Publishers, 2003), pp. 441-49.

[B5] **A. Le Padellec, X. Urbain, T. Nzeyimana, E. A. Naji**

Merged beam studies of associative ionization

dans *Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons*, édité par S. L. Guberman (Kluwer Academic / Plenum Publishers, 2003), pp. 343-50.

[B6] **F. Rabilloud, A. Le Padellec, P. Labastie, J. M. L'Hermite, F. Spiegelman**

The metastable fragmentation of silver bromide clusters

dans *The Physics and Chemistry of Clusters*, édité par E. Campbell, M. Larsson (World Scientific, 2003), pp. 292-95.

[B7] **J. Weiner,**

Cold and Ultracold Collisions in Quantum Microscopic and Mesoscopic Systems,

(Cambridge University Press, Cambridge UK, 2003).

[B8] **J. Weiner, P.-T. Ho,**

Light-Matter Interaction, Fundamentals and Applications,

(Wiley & Sons, New York, 2003).

2004

[B9] **T. Amand, V. Blanchet, B. Girard, X. Marie**

Coherent control in atoms, molecules and solids

dans *in Femtosecond laser pulses. Principles and Experiments*, édité par C. Rullière (Springer, 2004), pp. 333-94.

[B10] **M. Belkacem, M. A. Bouchene, P. G. Reinhard, E. Suraud**

Photodynamics of nanoclusters

dans *Encyclopedia of nanoscience and Nanotechnology*, édité par H. S. Nalwa (American Scientific Publishers, 2004), Vol. 8, pp. 575-591.

2005

[B11] **B. Chatel and N. Forget**

Sources ultracourtes accordables : état de l'art

dans *Lasers et Technologies Femtosecondes*, édité par M. Sentis and O. Uteza (Publications de l'Université Saint-Etienne, Saint Etienne, 2005), pp ; 207-221.

[B12] **B. Chatel, B. Girard**

Coherent Control of Atomic Dynamics with Chirped and Shaped Pulses

dans *Femtosecond Laser Spectroscopy*, édité par P. Hannaford (Springer, 2005), pp. 267-304.

[B13] **B. Girard**

Le Contrôle cohérent

dans *Lasers et Technologies Femtosecondes*, édité par M. Sentis and O. Uteza (Publications de l'Université Saint-Etienne, Saint Etienne, 2005), pp. 261-78.

[B14] **F. Calvo, P. Labastie**

Chapitre III : Thermodynamique et transition solide-liquide

dans *Nanoscience, tome 2 : Nanomatériaux*, édité par M. Lahmani, P. Houdy (Belin, à paraître).

11.5. Publications obtenues avant l'entrée au laboratoire par des chercheurs recrutés récemment.

E. Springate, S. A. Aseyev, S. Zamith and M. J. J. Vrakking

Electron kinetic energy measurements from laser irradiation of clusters

Phys. Rev. A **68**, 053201-1-7 (2003).

A. Wetzels, A. Gürtler, F. Rosca-Pruna, S. Zamith, M. J. J. Vrakking, F. Robicheaux and W. J. van der Zante

Two-dimensional momentum imaging of Rydberg states using half-cycle pulse ionization and velocity map imaging

Phys. Rev. A **68**, 041401R-1-4 (2003).

F. Lépine, S. Zamith, A. de Snaijer, C. Bordas and M. J. J. Vrakking

Observation of large quadrupolar effects in a slow photoelectron imaging experiment

Phys. Rev. Lett. **93**, 233003-1-4 (2004).

S. Zamith, A. Gürtler, L. D. Noordam, H. G. Muller and M. J. J. Vrakking

Control of the ionization by few cycle two color pulses

Opt. Lett. **29**, 2303-5 (2004).

S. Zamith, T. Martchenko, Y. Ni, S. A. Aseyev, H. G. Muller and M. J. J. Vrakking

Control of the Production of Highly Charged Ions in Femtosecond Laser Cluster Fragmentation

Phys. Rev. A **70**, 011201-1-4 (2004).

S. Zamith, S. A. Aseyev, E. Springate and M. J. J. Vrakking

Control of the production of highly charged ions in femtosecond laser cluster fragmentation

dans *Femtochemistry and Femtobiology: Ultrafast Events in Molecular Science*, édité par M. M. Martin and J. T. Hynes (Elsevier; Harbound, ISBN 0-444-51656-5, 2004), pp. 119.

11.6. Statistiques sur les publications de l'Unité

Année	Publications dans revues avec Comité de lecture	Conférences invitées		Conférences avec actes	Livres Sections de livres
		Internationales	Nationales		
2002	40	9	10	9	1
2003	34	21	4		7
2004	35	16	9	10	2
2005	35 + 6 soumis	17	4	6	4

12. Les collaborations du LCAR

12.1. Le LCAR et l'IRSAMC

Des programmes locaux impliquant plusieurs laboratoires de l'IRSAMC sont actuellement financés :

- PPF « Théorie et expériences en chimie » *resp C. Marsden* (LPQ, LCC, LHFA, LCI, LSPCMIB, CEMES)
- PPF « Fermions fortement corrélés » *resp D. Poilblanc* (LPT, LPQ, LPST, LNCMP, CEMES, LCC)
- PPF « Organisation de nanoparticules » *resp V. Paillard* (LPST, LPQ, LAAS, LCC, LPMC)
- PPF « Contrôle cohérent et calcul quantique » *resp B. Girard* (LCAR, LPT, LNMO)
- CPER « Spectroscopies Optiques Ultimes » *resp B. Girard* (LCAR, LNMO, LPST). 460 k€ pour le LCAR.
- CPER « Nanosciences, Nanomatériaux, Nanotechnologies » *resp. C. Joachim* (CEMES). 320 k€ pour le LCAR.

Les collaborations explicites entre équipes du LCAR et équipes d'autres laboratoires de l'IRSAMC sont les suivantes :

- **Spectroscopie, dynamique et Thermodynamique d'agrégats** : équipe agrégats (LCAR) – F. Spiegelmann, F. Calvo, G. Durand, M.-C. Heitz (LPQ)
- **Etude théorique de Dynamique ultrarapide de systèmes moléculaires** : Equipe « théorie » (LCAR) – M.-C. Heitz, F. Spiegelmann (LPQ)
- **Dynamique de fragmentation de complexes de van der Waals** : Equipe « théorie » (LCAR) – N. Halberstadt (LPQ)
- **Surfaces de potentiel électronique** : Equipe « théorie » (LCAR) – C. Teichtel (LPQ)
- **Dynamique d'agrégats en champ laser intense** : équipe « femtosecondes » du LCAR – Dynamique des agrégats (E. Surraud (LPT))

Le LCAR est directement concerné par le projet de renforcement de la thématique « physique et chimie aux temps courts » mis en avant par la cellule de réflexion sur l'avenir de l'IRSAMC.

12.2. Le LCAR et ses autres collaborations locales

Projet de mesure de **biréfringence magnétique du vide** (BMV, C. Rizzo). L'enjeu est de vérifier une prédiction de l'électrodynamique quantique. Des résultats préliminaires obtenus récemment par une équipe italienne pourraient être expliqués par l'existence de la matière sombre prédite par les cosmologistes. L'expérience menée en collaboration avec l'équipe de G. Rikken (LNCMP) a les capacités d'infirmer ou de confirmer cette découverte qui aurait un retentissement important. Des travaux menés en collaboration avec G. Bignami (CESR) étudient la possibilité d'observation de ces effets dans les étoiles à neutron.

Le **contrôle cohérent à l'échelle femtoseconde** a été développé en parallèle au LNMO (X. Marie, T. Amand) et au LCAR (B. Girard). Cette collaboration, initiée en 1992 dans le cadre d'une action conjointe soutenue par le Ministère, a permis le développement des

études aux temps courts à Toulouse. De nombreux mécanismes de contrôle cohérent ont été tout d'abord identifiés et testés dans des atomes ou molécules au LCAR, puis appliqués à des systèmes à semi-conducteurs au LNMO. Cette collaboration a été soutenue par des PPF successifs, puis par le CPER « Spectroscopies Optiques Ultimes ».

Forte collaboration N. Lorente (LCAR) – H Tang (CEMES) sur la **simulation d'images STM, AFM et manipulation de nano-objets** (ACI jeunes chercheurs 2001-2004).

Collaboration J. Weiner (LCAR) - C. Girard (CEMES) sur l'étude théorique d'images produites en champ proche par des nanostructures.

Détermination de spectres et de résonances par les méthodes de la résolvente (B. Lepetit (LCAR) – X. Gadea (CEMES)).

Le LMTG (SDU) s'est récemment équipé d'un laser femtoseconde de puissance permettant l'ablation de matériaux variés, pour la géodatation et l'analyse chimique. Celui-ci est couplé à un spectromètre de masse de haute résolution via une torche à plasma (IPCMS). La collaboration avec l'équipe « femtoseconde » du LCAR (B. Chatel) porte sur l'optimisation du processus (forme et nombre d'impulsions) afin de réduire le fractionnement chimique.

Une collaboration a été initiée en 2004 (BQR interdisciplinaire) entre B. Chatel (équipe « femtoseconde » du LCAR) et L. Salomé (IPBS (SDV)) sur des problèmes **d'imagerie haute résolution de nanoparticules** dans le but d'observer les mouvements de cellules biologiques.

12.3. Le LCAR et ses collaborations nationales

Structures nationales :

- **GDR « Fragmentation, agrégation et thermodynamique de systèmes complexes isolés »** (JM L'hermite, membre du bureau) : Finance de nombreuses collaborations (pour le LCAR, avec le LASIM (Lyon)).
- **Réseau de Diffusion des Technologies femtosecondes** (B. Chatel, coordinatrice depuis oct. 2004).
- **GDR « Optique atomique »** créé par C. Robilliard.

Equipe « Agrégats »

- P. Dugourd (LASIM, Lyon) : mesure de la polarisabilité des agrégats NaF
- C. Bréchignac (LAC, Orsay) : Etudes de thermodynamique d'agrégats.
- F. Rabilloud (LASIM, Lyon) : calculs d'énergies de photodétachement d'agrégats AgF

Equipe « Interférométrie Atomique »

a) avec F. Balembois (**Laboratoire Charles Fabry de l'Institut d'Optique** à Orsay) et P. Juncar (**INM-BNM au CNAM** à Paris) depuis fin 2003. Développement d'un laser à 671 nm par doublage d'un laser à 1342 nm pompé par diode de puissance à 808 nm. Ces deux groupes ont développé un laser assez analogue à 1320 nm. Ce laser pourra intéresser toutes les équipes travaillant sur l'atome de lithium et peut-être de manière plus large car nous espérons un laser intense (plusieurs Watt) et monofréquence. La question publication ou brevet pour valorisation n'est pas tranchée actuellement.

b) avec O. Cugat (**Laboratoire d'Electrotechnique, INPG/UJF – CNRS (STIC) UMR 5529**), pour le développement d'aimants pour isolateur optique de hautes performances et diode optique. Les isolateurs optiques intéressent A. Brillet pour le grand interféromètre Virgo. Première demande de brevet déposée auprès du CNRS DAE (Juin 2004). Un

prototype donnant 1.73 Tesla a été réalisé et un deuxième prototype donnant 1,64 Tesla dans un diamètre de 22 mm a été construit. Une deuxième demande de brevet sera présentée très prochainement.

- c) En projet un **réseau " OPTIQUE ATOMIQUE QUANTIQUE "** (programme Midi-Pyrénées – PACA en cours d'examen), regroupant 3 équipes de recherche et 2 PME :
- l'équipe « Interférométrie Atomique » du LCAR,
 - l'équipe de F. Vedel au laboratoire PIIM-Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires UMR6633 CNRS-UAM1 (Dir. PR R. Stamm) Université de Provence Centre de Saint- Jérôme,
 - l'équipe de R. Kaiser et Ch. Miniatura à l'INLN- Institut Non Linéaire de Nice, UMR 6618 du CNRS (Dir. PR J. Tredicce), Université de Nice-Sophia Antipolis, 1361, route des Lucioles, 06560 Valbonne,
 - CILAS- Marseille, Zi Saint-Mitre, av. de la Roche Fourcade, 13400 Aubagne, pour la fabrication de miroirs de haute finesse,
 - GECODAGIS SARL, 16, rue d'Auriac, 31310 Rieux Volvestre, pour la caractérisation de vibration de nos montages expérimentaux.

Equipe « Biréfringence Magnétique du Vide »

- **Réalisation d'une cavité de très haute finesse optique** (Mackowski (LMA Lyon))

Equipe « nano » (Manipulations d'atomes par champs proches issus de nanostructures)

- Réseaux de nanophotocathodes (G. Lampel, LPMC, Ecole Polytechnique, Palaiseau)

Equipe « Spectroscopie femtoseconde et contrôle cohérent »

- **Dynamique femtoseconde des états de Rydberg de l'acétylène** (D. Gauyacq, LPPM Orsay), programme PCMI de l'INSU.
- **Développement de techniques de mesure d'impulsion lasers ultracourtes** (JP Chambaret (LOA, Palaiseau)).
- Caractérisation d'un **façonneur d'impulsion visible (DAZZLER)**. Application à la mise en forme d'un NOPA (Amplificateur paramétrique Optique Non-colinéaire) Société Fastlite (Palaiseau).
- **Développement d'un NOPA** (Société Amplitudes Technologies (Evry)).
- **Application d'impulsions attoseconde** (CELIA, Bordeaux)

Equipe « Spectrométrie d'électrons dans les collisions»

Collisions ion - fullerène C₆₀ :

- Collaboration théorie - expérience avec F. Martin (UAM, Madrid) - P.A. Hervieux (Metz) -M.F. Politis (GPS, Paris) sur He²⁺ + C₆₀.
- Collaboration avec Bernd Huber (CIRIL-GANIL, Caen) sur ion multichargé C₆₀ à des énergies de l'eV (formation d'endofullerène).

Ion-molécule biologique :

- Collaboration avec M. et B. Farizon (Institut Physique Nucleaire Lyon) sur les molecules biologiques solvatées
- K. Wohrer (LCAM Orsay) sur les petits agrégats de Carbone

Equipe « Collisions ions – surface »

LGE Toulouse (Patrice Raynaud) et **Laboratoire IMP à Perpignan** : premiers tests d'analyse de composition de dépôts à partir d'organo-silices (mesure de la quantité d'hydrogène en particulier).

Equipe « Théorie »

- M.-L. Bocquet, ENS chimie Lyon, co-tutelle de thèse de Hervé Lesnard. Excitation vibrationnelle avec le microscope à effet tunnel.
- B. Grandidier, ISEN Lille, excitation vibronique sur surface de semiconducteurs.
- A. Salim, LPCM Bordeaux, dissociation de H₂ sur les métaux.

12.4. Le LCAR et ses Collaborations internationales

(seules sont répertoriées les collaborations financées ou ayant donné lieu à publications)

Equipe « Agrégats »

- Programmes d'action intégrés (PAI) du Ministère des Affaires Etrangères :
 - § PROCOPE avec L. Wöste (Berlin) (2003-2004) *et équipes théorie, femtoseconde*

Equipe « Optique - Interférométrie Atomique »

- Programmes d'action intégrés (PAI) du Ministère des Affaires Etrangères :
 - § PROCOPE avec J. P. Toennies au Max Planck Institute für Strömungsforschung à Göttingen (PROCOPE MAE, 2002-04): mesure par interférométrie atomique de la neutralité électrique de l'atome d'hélium.

Equipe « Optique - Biréfringence Magnétique du Vide »

- Programme OTAN puis RI CNRS avec D. Bakalov (Sofia) (2002-2003) *et équipe Théorie*
- Chercheur invité CNRS : G. Bialolenker (Beer Sheva (Israël)) (2004-2005)
- A. Rizzo (Pise) : Calculs d'effet Kerr
- Programmes d'action intégrés (PAI) du Ministère des Affaires Etrangères :
 - § ARC EN CIEL : C. Rizzo / A. Arie et G. Bialolenker (Université de Tel Aviv Beer Sheva, Israël 2001-2002)

Equipe « nano » (Manipulations d'atomes par champs proches issus de nanostructures)

- Réseaux européens :
 - § FASTNet (Field Atom Surface Training Network) RTN, (2002-2006) *J. Weiner PI*
 - § NANOCOLD (Manipulation d'atomes froids par forces lumineuses) IST (2003-2004)
 - § ATOMSURF en cours d'évaluation, *J. Weiner PI*
- Programmes d'action intégrés (PAI) du Ministère des Affaires Etrangères :
 - § STAR avec Seoul National University, Physics Department
- Programme COFECUB avec V. Bagnato et L. G. Marcassa (Istituto de Fisica de Sao Carlos (Brésil)) : Etudes de collisions froides

Equipe « Spectroscopie Femtoseconde et Contrôle Cohérent »

- Réseaux Européens Marie Curie :
 - § COCOMO (COherence and COntrol in atomic and MOlecular systems) *RTN FP5* (2000-2004)
 - § XTRA (Generation of X-rays Attoseconde and Applications) avec CELIA *RTN FP6* (2004-2008)
 - § CAMEL avec Sofia *TOK FP6*
- Programmes d'action intégrés (PAI) du Ministère des Affaires Etrangères :
 - § PROCOPE avec G. Gerber (Würzburg), L. Wöste (Berlin) (2003-2004) *et équipes théorie, agrégats*
 - § SAKURA avec K. Ohmori (ILMS, Okazaki) *et équipe théorie* (2005-2006)
 - § VANGOGH avec M. Vrakking (AMOLF, FOM Amsterdam) (1998-2003)
- Relations Internationales CNRS et chercheur invité CNRS:
 - § A. Stolow (NRC Ottawa) (2003-2004)
 - § B. Whitaker (Leeds) (2005-2006)
- Actions Ponctuelles UPS (et invitations UPS)
 - § M. Motzkus (MPQ Garching)
 - § W. Schleich (Ulm)
 - § N. Vitanov (Sofia)

Séjour de longue durée dans des laboratoires étrangers :

- Cavendish Laboratory Cambridge (GB) : V. Blanchet (1 an en 2003-2004)
- UCSB-Santa-Barbara (USA) : V. Blanchet (3 mois en 2005)

Equipe « Spectrométrie d'électrons »

- Programmes Européens :
 - § Réseau européen COST P9 'RADAM' Radiation damages in biomolecular system (2003-2007)
 - § Réseau LEIF (Low Energy Ion beam Facility) (2000-2003) et (2005-2009)
- X. Urbain (UCL, Belgique) sur les processus d'association dans les collisions ions-molécules

Equipe « Collisions ions – surface »

- USTBH (Alger) : Collaboration informelle suite a un contrat CMEP terminé en 2000 : mise a disposition du dispositif expérimental chaque année sur une période de 1 mois environ.
- Département de Physique et Astronomie, Université d'Aarhus, Danemark (D. Field), The Open University, Milton Keynes, Angleterre (N.J. Mason), Queen's University, Belfast, Irlande du Nord (T.A. Field), collaboration de J.-P. Ziesel sur les collisions d'électrons de très basse énergie.
- Programme Européen :
 - § EPIC (2002-2005) : Electron and Positron Induced Chemistry (J.-P. Ziesel)

Equipe « Théorie »

- Programmes d'action intégrés (PAI) du Ministère des Affaires Etrangères :
 - § PROCOPE avec C. Voyvod (Munich) (2004-2005), L. Wöste (Berlin) (2003-2004 *et équipes agrégats, femtosecondes*), V. Engel (Würzburg) (2003-2004), J. Pascual (Berlin) (2005-2006)
 - § BARRANDE avec I. Páidarova (Prague)
 - § VAN GOGH avec G.-J. Kroes (Leyden) (2001-2002)
 - § PICASSO avec O. Roncero (Madrid) soutien aussi des RI CNRS (2004-2005)

- INTAS avec O. Vasyutinskii (St-Petersburg), A. Buchachenko (Moscou)
- Programme OTAN (2002-2003) puis RI CNRS avec D. Bakalov (Sofia) (2004-2005)
et équipe BMV
- Chercheur invité CNRS et Ambassade de France au Danemark :
 - § M. Brandbyge, DTU Lyngby Danemark
- Actions Ponctuelles de coopération UPS
 - § Etats-Unis : A. Kupperman (Berkeley), B. Jackson (Massachusetts)
 - § Russie : A. Buchachenko, Tsikerbul
 - § Allemagne
- Ambassade de France au Canada : H. Guo, McGill Montréal Québec
- Japan Society for the promotion of Science 2004 : H. Ueba, Toyama University, Japon.

13. Le bilan financier (2002-2005)

13.1. Budget 2002

Organisme Financeur	Soutien de base € HT	Actions spécifiques € HT	
		Fonct./Equip	Salaires
CNRS SPM	88 400		
Soutien de base			
CPER Bertrand Girard		15 000	
Action spécifique Jacques Vigué		15 000	
Action spécifique Jeunes chercheurs N. Lorente		61 439	
Action spécifique Jeunes chercheurs C. Rizzo		50 000	
SPM + DRI Coopération avec le Canada B. Girard ⁷⁴		18 671	
Ecole d'Eté sur le contrôle cohérent ⁷⁵	3 000		
MENRT	67 049		
Dotation Recherche PPF B. Girard ⁷⁶		5 183	
UPS			
BQR A. Bordenave-Montesquieu		4 234	
RI Espagne A. Bordenave-Montesquieu		300	
IRSAMC A. Bordenave-Montesquieu		1 700	
Région Midi-Pyrénées			
Contrat Région Jacques VIGUE		18 374	
Contrat Région John WEINER		41 820	
CPER John WEINER		91469	
CE NANOCOLD J. Weiner ⁷⁷		53 940	18 176
INTAS A. Beswick		1 306	
FASTNET J. Weiner ⁷⁸		5 379	
COCOMO B. Girard ⁷⁹		15 992	5 290
Total	155 449	402 807	23 466
			581 722

⁷⁴ Cette somme versée le 20/09/2002 n'ayant pas été dépensée à la fin de 2002, une fraction égale à 9 352 € a été annulée au début de 2003.

⁷⁵ Soutien Ecole d'Eté sur le contrôle cohérent à Cargèse.

⁷⁶ Programme Pluri-Formation (PPF) MENRT Bertrand Girard (10 366 € dont 5 183 € pour Th. Amand LPMC)

⁷⁷ Contrat européen NANOCOLD (Crédits justifiés)

⁷⁸ Contrat européen FASTNET (Crédits justifiés)

⁷⁹ Contrat européen COCOMO (Crédits justifiés)

13.2. Budget 2003

Organisme Financier	Soutien de base	Actions spécifiques		
	€ HT	€ HT		
		Fonct./Equip	Salaires	
CNRS SPM				
Soutien de base	73 694			
Action spécifique P.Labastie		20 000		
Convention avec le CEA, B. Girard		36 158		
SPM + DRI Coopération avec le Canada, B. Girard		15 000		
GDR « Agrégat, dynamique et réactivité »		2 075		
LOA ⁸⁰		363		
LCQMM ⁸¹		185		
MENRT				
Dotation Recherche ⁸²	57 870			
PPF B. Girard ⁸³		2 926		
UPS				
BQR Carlo Rizzo		5 017		
BQR Manifestation scientifique ⁸⁴		1 338		
BQR avec accompagnement IRSAMC Carlo Rizzo		1 675		
Région				
Subv Projet NoE Coherent Quantum Matter		5 017		
2 ^{ème} année Contrat Région MIP Jacques VIGUE		23 271		
CE				
NANOCOLD J. Weiner		50 445	38 080	
COCOMO B. Girard		25 041	66 472	
INTAS A. Beswick		520		
FASTNET J.Weiner		32 387	20 543	
Total	131 564	221 418	125 095	478 077

⁸⁰ Participation du Laboratoire d'optique appliquée de Palaiseau à mission B. Chatel

⁸¹ Participation du Laboratoire de chimie quantique et de modélisation moléculaire à mission C. Meier

⁸² Le contrat quadriennal a été notifié à l'UPS en septembre 2003, mais il a fallu attendre novembre 2003 pour que la mise en place des sommes nous soit proposée ; comme il s'agit uniquement de crédits de fonctionnement, nous avons opté pour le report sur 2004 d'une grosse fraction des crédits MENRT, ayant utilisé tous les autres crédits disponibles pour faire fonctionner le laboratoire. Ce montant diffère de celui indiqué dans le § 2.5 du Message du directeur.

⁸³ PPF « Contrôle cohérent et calcul quantique » responsable B. Girard

⁸⁴ BQR Manifestation scientifique COLOQ'8 et Horizons'03

13.3. Budget 2004

Organisme Financier	Soutien de base € HT	Actions spécifiques € HT		
		Fonct./Equip	Salaires	
CNRS SPM	88 000			
SPM + DRI Coopération avec le Canada, B. Girard		15 000		
Equipement : Projet BMV C. Rizzo		15 000		
Moyen spécifique J. Vigué (Développement laser)		10 500		
DRI : Accueil de D. Bakalov		2 000		
Rémunération A. Arbouet				3 200
MENRT				
Dotation recherche 2004	67 517			
Complément dotation recherche 2003 ⁸⁵	9 647			
FNS ACI Nanocold J. Weiner 2003		25 585		
FNS ACI Nanocold J. Weiner 2004		25 585		
MJENR – ACI : NANO Coop. Europ. J. Vigué		9 030		
PPF B. Girard ⁸⁶		2 926		
UPS				
BQR B. Chatel ⁸⁷		14 000		
BQR J. Vigué ⁸⁸		10 033		
BQR accompagnement IRSAMC J. Vigué		1 672		
APC B. Lepetit, USA ⁸⁹		794		
Coop. Scient. Paris-Sud J. Weiner ⁹⁰		627		
Contrat				
BNM/LNE J. Vigué, Développement Laser		6 773		
Région				
Maniféstation scientifique COLOQ'8 et Horizons'03		3 186		
CE				
NANOCOLD J. Weiner		47 962	25 389	
FASTNET J. Weiner		35 968	84 912	
COCOMO B. Girard		10 322	7 288	
Total	165 164	236 963	113 501	515 628

⁸⁵ Régularisation dotation recherche 2003 reportée en 2004.

⁸⁶ PPF « Contrôle cohérent et calcul quantique » responsable B. Girard

⁸⁷ BQR AO3 (pluridisciplinaire), B. Chatel – F. Poitrasson (LMTG)

⁸⁸ BQR AO1: Développement Laser, J. Vigué

⁸⁹ Action ponctuelle de coopération 3^{ème} tranche 2003, B. Lepetit, USA

⁹⁰ Participation aux frais de mission de John Weiner, coopération scientifique entre Paris 11 et la Havane.

13.4. Budget 2005

Organisme Financier	Soutien de base € HT	Actions spécifiques € HT		
		Fonct./Equip	Salaires	
CNRS SPM	100 000			
Action spécifique J. Vigué ⁹¹		25 000		
CPER B. Girard ⁹²		35 000		
FSE A. Arbouet ⁹³		1 800		
IN2P3 C. Rizzo ⁹⁴		7 000		
DRI : Accueil de D. Bakalov ⁹⁵		2 000		
Réseau Tech. Femtoseconde B. Chatel		1 000		
MENRT	67 517			
Dotation recherche 2005				
MJENR – ACI : NANO Coop. Européenne J. Vigué PPF B. Girard ⁹⁶		1 003 2 926		
UPS				
BQR C. Rizzo ⁹⁷		10 033		
BQR accompagnement IRSAMC C. Rizzo ACP D. Lemoine, USA		3 344 669		
Contrat				
BNM/LNE J. Vigué Développement Laser Amplitude Technologie B. Chatel ⁹⁸		8 278 10 600		
CPER B. Girard ⁹⁹		239 500		
CE				
FASTNET		27 580	6 344	
Académie des Sciences				
Prix Simone et Cino Del Duca		83 612	64 000	
Total	167 517	459 345	70 344	697 206

Deux demandes d'ANR ont été acceptées. Les crédits seront mis en place en 2006.

⁹¹ Equipement : Mesures de précision en interférométrie atomique

⁹² Equipement CPER : Projet MPTA-5 Spectroscopies Optiques Ultimes avec le Laboratoire de Physique des Solides de Toulouse (LPST) et le Laboratoire de Physique de la Matière Condensée de l'INSA

⁹³ Convention FSE accueil de doctorant A. Arbouet

⁹⁴ Participation de l'IN2P3 au projet Mesure de la Biréfringence du vide, C. Rizzo

⁹⁵ Convention CNRS/Académie des Sciences de Bulgarie

⁹⁶ PPF « Contrôle cohérent et calcul quantique » responsable B. Girard

⁹⁷ BQR AO1 : Mesure de la Biréfringence Magnétique du Vide, C. Rizzo

⁹⁸ Projet : Mise au point d'un amplificateur paramétrique optique non colinéaire et mélange non-linéaire permettant une sortie UV femtoseconde.

⁹⁹ CPER « Spectroscopies optiques ultimes »

13.5. Crédits du Laboratoire : répartition

13.5.1. Tableau des attributions Fonctionnement Général (en k€ HT)

	2002	2003	2004	2005
Administration	3,1	3,3	5	3,6
Services communs + atelier	3,5	6	9	18,5
Séminaires	1,4	1,4	1,4	2
Bibliothèque	4,57	3,8	1,4	4,5
Abonnement Internet et réseau informatique	1,4	1,3	1,2	2,9
Bibliothèque de programme	1,3	1,4	1,5	2,1
Réserve du Directeur	6,2	3	3,6	4,7
<i>Total</i>	21,47	20,2	23,1	38,3

13.5.2. Sommes attribuées en fonctionnement aux équipes (en k€ HT)

	2002	2003	2004	2005
Clusters (P. Labastie/J.M. L'Hermite)	9,4	9,3	9,2	12,7
Optique (J. Vigué et C. Rizzo)	20,5	17,5	19,4	24,3
Nano (J. Weiner)		12,3	13,9	14,8
Femto (B. Girard)	15,8	17,7	15,9	22,6
Collisions (A. Bordenave-Montesquieu / P. Moretto-Capelle)	13,6	11,2	10,5	12,8
Ions-Surface (C. Benazeth, M. Richard-Viard)	12,7	12,7	13,4	15,2
Théorie (A. Beswick)	13,3	13,6	14,2	16,4
<i>Total</i>	85,3	94,3	96,5	118,8

13.5.3. Equipement (en k€ HT)

	2002	2003	2004	2005
Clusters (P. Labastie/J.M. L'Hermite)	3,4		15,3	1,3
Optique (J. Vigué et C. Rizzo)	2,4		32	
Nano (J. Weiner)				
Femto (B. Girard)			3,3	
Collision (A. Bordenave-Montesquieu / P. Moretto-Cappelle)	5,3		4,7	4,8
Ions-Surf (C. Benazeth, M. Richard-Viard)	7,3	4,5	4	
Théorie (A. Beswick/C. Meier)	7		4,9	2,3
Service commun				
Poste à soudure TIG	4,2			
Détecteur de fuite		12,3		
Imprimante laser		3,4		
Autocad			2,8	
Pompe primaire			2,5	
<i>Total</i>	29,6	20,2	69,5	8,4

NB : Fin 2003 à la signature du contrat quadriennal, les compléments de crédits attribués ont été reportés en 2004.

14. Bilan sur l'évolution du personnel de l'Unité

14.1. Le personnel de l'unité au 31 décembre 2005

Organisme	Nom prénom	Grade
CNRS	VIGUE Jacques	DR
	BLANCHET Valérie	CR
	BÜCHNER Matthias	CR
	CHATEL Béatrice	CR
	LEMOINE Didier	CR
	LEPETIT Bruno	CR
	L'HERMITE Jean-Marc	CR
	MORETTO-CAPELLE Patrick	CR
	RICHARD-VIARD Martine	CR
	ROBILLIARD Cécile	CR
	ZAMITH Sébastien	CR
	BAILLY Gilles	IR
	FAURE Stéphane	IE
	GEORGES Agnès	T
	GIANESIN Michel	T
	POLIZZI Laurent	T
	PAQUIER Philippe	AI
ROLLAND Marie France	IE	
TRENEC Gérard	IR	
UPS	BENAZETH Claude	PR
	BENOIT-CATTIN Pierre	PR émérite
	BESWICK Alberto	PR
	BOUCHENE Aziz	PR
	GIRARD Bertrand	PR
	LABASTIE Pierre	PR
	MEIER Christophe	PR
	RIZZO Carlo	PR
	WEINER John	PR
	CAFARELLI Pierre	MCF
	LE PADELLEC Arnaud	MCF
	LORENTE Nicolas	MCF
	MATHEVET Renaud	MCF
	SENCE Martine	MCF
	BAYNARD Elsa	IE
	CASTEX Daniel	T
	LAGARRIGUE Roland	T
VOLONDAT William	T	
ATER	DELAGNES Jean-Christophe	
DOCTORANTS	ALLOSCHERY Olivier	
	ATHER HASHMI Faheel	
	CHIROT Fabien	
	GAY Guillaume	
	JACQUEY Marion	
POST-DOCTORANTS	MONTURET Serge	
	PINTO DA SOUZA Benoit	
POST-DOCTORANTS	RAFFAEL Kevin	
	BRANDI Fernando (arrivée prévue le 01/12/05)	

14.2. Son évolution récente

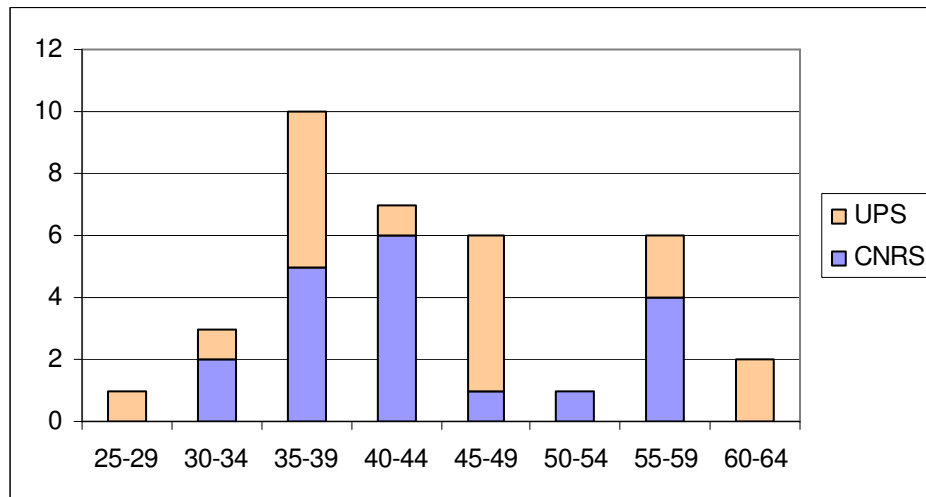
	Arrivée	Départs
2003	Didier LEMOINE (a) Gilles BAILLY (b)	
2004	Sébastien ZAMITH (c)	
2005	Elsa BAYNARD (IE) (e) Daniel CASTEX (T) (f)	Alain BORDENAVE-MONTESQUIEU (d) Danièle BORDENAVE-MONTESQUIEU (d) Jean-Pierre ZIESEL (d)

- (a) Didier LEMOINE (CR1) a été muté au LCAR le 1^{er} mai 2003 en provenance de l'UMR 8523 Laboratoire de physique des lasers, atomes et molécules (PhLAM) de Villeneuve d'Ascq
- (b) Gilles BAILLY a été recruté IR par concours externe le 1^{er} décembre 2003
- (c) Sébastien ZAMITH a été recruté en CR2 le 1^{er} octobre 2004
- (d) Alain BORDENAVE-MONTESQUIEU, Danièle BORDENAVE-MONTESQUIEU, Jean-Pierre ZIESEL, départ à la retraite au 1^{er} septembre 2005
- (e) Elsa BAYNARD est recrutée par concours externe université le 1^{er} décembre 2005
- (f) Daniel CASTEX est promu par concours interne université. Il était sur un poste IRSAMC jusque là.

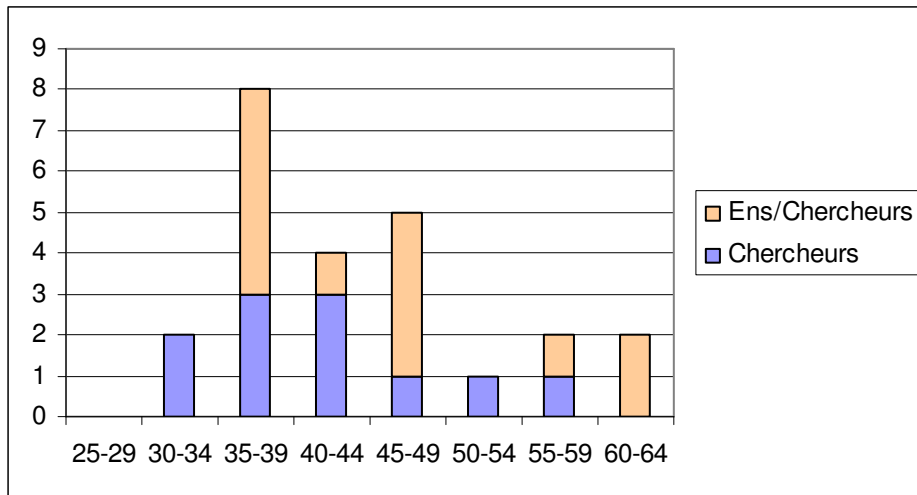
14.3. La pyramide des âges des personnels de l'unité présents au 1^{er} Janvier 2006

Moyenne d'âge au 31/12/2001 : 43,8 ans

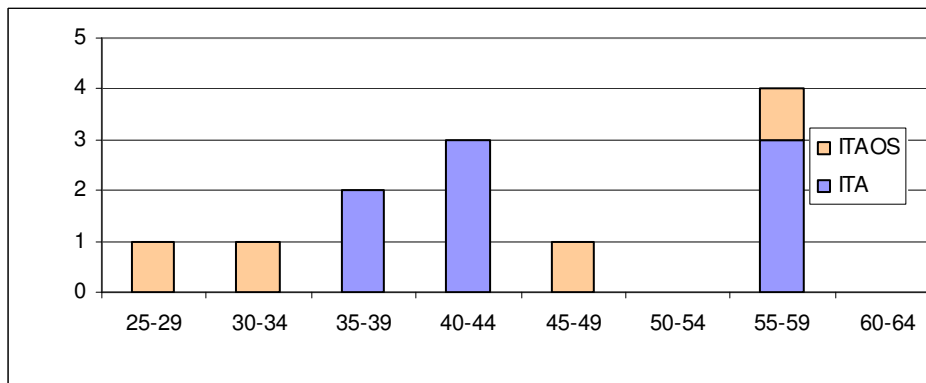
Moyenne d'âge au 01/01/2006 : 42,6 ans (pour 36 permanents : 19 CNRS + 17 UPS)



Chercheurs et Enseignants-Chercheurs



ITA / IATOS



14.4. Les doctorants accueillis dans le laboratoire

1991

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
RAKOTOARISOA Louis	P. Labastie	Septembre 1991	12 décembre 1995	MENRT	Non renseigné

1992

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
DURAND Agnès	J. Vigué	Octobre 92	13 décembre 1995	MENRT - Moniteur	MCF à l'Univ. du Littoral à Dunkerque - 1996
CABROL Olivier	B. Girard	Novembre 92	13 décembre 1996*		Ingénieur Entreprise

1993

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
BLANCHET Valérie	B. Girard	Septembre 93	11 octobre 1996	MENRT	Post-Doc (A. Stolow, NRS, Ottawa Canada) CR CNRS LCAR (01/10/1998)
PONCHARAL Philippe	P. Labastie	Septembre 93	26 septembre 1996	MENRT - Moniteur	Service National 1996-1997 Post-Doc (W de Heer, Atlanta, Georgia, USA) 1997-1999) MCF à Montpellier – 1999
MOUHAMMAD Souheil	C. Benazeth	Novembre 93	4 juin 1997		Post-Doc (J.W. Rabalais, Univ. De Houston, Texas, USA)

1994

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
CALVO Florent	P. Labastie	Avril 94	11 juin 1998*	AMN	CR CNRS (en 2000) au LPQ Univ. P. Sabatier
BAZALGETTE Grégory	J. Vigué	Septembre 94	15 décembre 1997	MENRT 94-97 ATER 97-98	Post-Doc (S. Stolte, Vrije Universiteit, Amsterdam, Pays-Bas) 1998 -2000 puis Ingénieur à TPD, Delft, Pays-Bas

*Ces thèses ont duré 4 années mais le doctorant a dû effectuer son Service National en cours de thèse.

1995

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
BOISSEAU Christophe	J. Vigué	Septembre 95	1 ^{er} février 1999	MENRT ATER 98-99	Post-Doc (R. Côté, Univ. of Connecticut, USA) depuis 03/00 Post-Doc à l'OGG/INFM-ILL à Grenoble° Ingénieur Industrie à Steam France
NICOLE Céline	A. Bouchène	Novembre 95	22 décembre 1998	MENRT	Post-Doc (M. Vrakking, AMOLF, Amsterdam) 1999-2000 Ingénieur Philips, Pays Bas

1996

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
CHAMPENOIS Caroline	J. Vigué	Septembre. 96	17 décembre 1999	AMN ATER 99-2000	ATER PIIM Marseille CR PIIM Marseille en 2001
ABIDI Saïd	C. Benazeth	Novembre 96v	22 juin 2000	Bourse Marocaine	
PRE Thierry	A. Beswick	Octobre 96	Thèse non soutenue	MENRT	Professeur Agrégé Classes Préparatoires - 1999

1997

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
FERNANDEZ-ALBERTI Sebastian	A. Beswick	Février 97	4 juin 1999	Bourse Argentine	MCF Univ. de Quilmes, Argentine - 1999
RABILLOUD Franck	P. Labastie	Septembre 97	27 octobre 2000	MENRT	Post-Doc à Valladolid (01/2001-08/2001) MCF, Univ. Claude Bernard à Lyon (Sept.2001)

1998

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
ZAMITH Sébastien	B. Girard	Septembre 98	6 décembre 2001	MENRT	Post-Doc (M. Vrakking, AMOLF, Amsterdam) CR CNRS LCAR (01/10/2004)

1999

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
GINDENSPERGER Etienne	A. Beswick/C. Meier	Septembre 99	29/05/2003	MENRT	Post-Doc bourse von Humboldt chez L. Cederbaum, Heidelberg, Allemagne
DELHUILLE Rémi	C. Rizzo/M. Büchner	Septembre. 99	16/12/2002	MENRT-Moniteur	Post-Doc Groupe de T.W.HÄNSCH à Munich (Allemagne) En recherche d'emploi
DEGERT Jérôme	B. Girard	Septembre 99	02/12/2002	MENRT	Post-Doc au MPI à Garching (Allemagne) mars - août 2003 MCF, Université de Bordeaux

2000

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
RENTENIER Arnaud	P. Moretto Capelle	Septembre. 00	23/04/2004	MENRT	CDD en Entreprise
LEVEQUE Gaëtan	J. Weiner/ Ch. Girard (CEMES)	Septembre. 00	19/12/2003	MENRT	Post-doc à l'Ecole Polytechnique de à Lausanne (Suisse)

2001

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
DUPAYS Arnaud	A. Beswick/ C. Rizzo	Septembre 01	18/06/2004	MENRT	ATER à l'UPS Post-doc bourse von Humboldt chez Prof. W. Domcke, TUM Munich
MIFFRE Alain	J. Vigué	Septembre 01	23/06/2005	MENRT	ATER PIIM Marseille
NIEUWJAER Nicolas	M. Richard-Viard	Septembre 01	05/07/2005	MENRT	Post-Doc (Prof. P. Bertrand, Louvain La neuve)

2002

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
MONMAYRANT Antoine	B. Chatel	Septembre 02	27/06/2005	AMX	Post-doc (Prof. Ian Walmsley à l'Université d'Oxford)
DELAGNES Jean-Christophe	A. Bouchène	Septembre 02	Décembre 2005	MENRT	ATER à l'UPS
GAY Guillaume	J. Weiner	Septembre 02		MENRT	

2003

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
ALLOSCHERY Olivier	J. Weiner	Septembre 03		MENRT	
JACQUEY Marion	J. Vigué	Septembre 03		MENRT	

2004

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
CHIROT Fabien	J.M. L'Hermitte	Septembre 04		MENRT/Moniteur	

2005

NOM	Directeur de thèse	Date d'arrivée	Date de soutenance	Financement	Après la thèse
ATHER HASHMI Faheel	A. Bouchène	Septembre 05		Ministère des Affaires étrangères	
MONTURET Serge	N. Lorente/ C. Meier	Septembre 05		MENRT/Moniteur	
PINTO DA SOUZA Benoit	C. Rizzo	Septembre 2005		MENRT/Moniteur	

Devenir des doctorants

Thèses soutenues entre 1995 - 2002

	LCAR	Extérieur
Chercheur CNRS	2	2
Maître de conférence		5
Ingénieurs industrie		4
Enseignant Classe Préparatoire		1
Retour à l'étranger		3
Recherche d'emploi		1

Thèses soutenues entre 2002 - 2005

	LCAR	Extérieur
Post-doctorant/ATER		6
CDD		1

14.5. Post-doctorants accueillis en 2002-2005

NOM	Date d'arrivée	Date de départ	Financement	Provenance
VIARIS DE LESEGNO Bruno	01/09/2002	31/08/2004	Projet Européen NANOCOLD	Paris 13, Villetaneuse
TURRI Giorgio	15/11/2002	31/01/2004	Projet Européen COCOMO	Italie
ZAHARIEV Peter	01/03/2003	31/01/2004	Projet Européen COCOMO	Bulgarie
RADESCU Silvana	01/03/2003	31/08/2003	ACI Jeune Chercheur	Tenerife, Espagne
O'DWYER Colm	01/09/2003	30/11/2004	Projet Européen FASTNET	Irlande
RURALI Riccardo	01/01/2004	31/12/2005	Bourse Nanotec Generalitat de Catalunya	Barcelone, Espagne
BALOCCHI Andréas	01/03/2004	28/02/2005	Projet Européen FASTNET	Italie
RAFFAEL Kevin	01/10/2005	30/09/2006	CNRS	Angleterre
BRANDI Fernando	01/12/2005	31/11/2007	Bourse Marie Curie	Italie

14.6. Professeurs invités et chercheurs associés accueillis en 2002-2005

Professeurs invités UPS :

Bengt LUNDQUIST, Suède, 1 mois : 15/11/2002 au 15/12/2002 (Equipe Théorie)
Carsten HENKEL, Allemagne, 1 mois : avril 2003 (Equipe Nano)
Alexey BUCHACHENKO, Russe, 2 mois : 10/3/2004 au 10/05/2004 (Equipe Théorie)
Pablo ORDEJON RONTHOME, Espagne, 1 mois : novembre 2004 (Equipe Théorie)

Chercheurs associés CNRS (en moyenne 6 mois/an) :

Mads BRANDBYGE, Danemark, 3 mois : 01/10/2003 au 31/12/2003 (Equipe Théorie)
Eduardo HERNANDEZ, Espagne, 3 mois : 01/05/2004 au 31/07/2004 (Equipe Théorie)
James LISY, USA, 3mois : 16/08/2004 au 11/11/2004 (Equipe Théorie)
Gabriel BIALOLENKER, Israël, 9 mois : 30/08/2004 au 29/05/2005 (Equipe BMV)
Benjamin WHITAKER, GB, 6 mois : 01/12/2005 au 30/05/2006 (Equipe Femto)

15. Responsabilités exercées par les membres du LCAR

15.1. Composition du Conseil de Laboratoire à compter du 1^{er} janvier 2005

<p><u>Membre de droit :</u> Bertrand GIRARD (Directeur du Laboratoire)</p> <p><u>Membres élus :</u></p> <p>Chercheurs/Enseignants Chercheurs : Matthias BÛCHNER Didier LEMOINE Jean-Marc L'HERMITE Renaud MATHEVET Patrick MORETTO-CAPELLE</p> <p>ITA : Roland LAGARRIGUE</p> <p>Doctorant : Jean-Christophe DELAGNES</p>	<p><u>Membres nommés :</u></p> <p>Chercheurs/Enseignants Chercheurs : Jacques VIGUÉ Christoph MEIER Martine RICHARD-VIARD</p> <p>ITA : Laurent POLIZZI Gilles BAILLY</p> <p>Doctorant : Olivier ALLOSCHERY</p>
--	--

Invités permanents : les chefs d'équipes non élus ou nommés, C. Rizzo, J. Weiner, N. Lorente.

15.2. Responsabilités au sein du LCAR 2002-2005

<i>Directeurs :</i>	Jacques Vigué jusqu'au 31/12/2004 Bertrand Girard à compter de 01/01/2005
<i>Directeur-adjoint / Adjointe au Directeur :</i>	Bertrand Girard du 01/01/2003 au 31/12/2004 Martine Richard-Viard à compter du 01/01/2005
<i>Correspondant Information :</i>	Bruno Lepetit
<i>Responsable des Séminaires LCAR :</i>	John Weiner, 2004-2005 Nicolas Lorente, 2003-2004 Bruno Lepetit, 2001-2003
<i>Correspondants LCAR pour séminaires IRSAMC :</i>	Valérie Blanchet 2000-2002 J.P. Ziesel 2003 Béatrice Chatel 2003-2005 Sébastien Zamith 2005-
<i>Responsable Europe :</i>	John Weiner
<i>Correspondant Formation :</i>	Marie France Rolland
<i>Groupe de travail informatique :</i>	Pierre Labastie Didier Lemoine Matthias Büchner
<i>ACMO :</i>	Gérard Trédec
<i>Secouristes :</i>	Valérie Blanchet Cécile Robilliard
<i>Mise à jour du site WEB :</i>	Marie France Rolland

15.3. Responsabilités au sein de l'IRSAMC 2003-2006

Conseil de l'IRSAMC :

M. Aziz Bouchène, Jacques Vigué (2003-2004), Bertrand Girard (2005-2006), Pierre Labastie

15.4. Responsabilités en dehors du LCAR

- **A l'Université Paul Sabatier**

- *Administration* :

- . Martine Sence : directrice adjointe de l'UFR PCA (membre du CA et du bureau)
- . Conseil Scientifique de l'UFR PCA : Béatrice Chatel (membre du bureau 2003-2006), Carlo Rizzo (2003-2006), Bertrand Girard (1995-2003)

- *Evaluation* :

Commission des spécialistes 29^{ème} section UPS : Jean-Marc L'Hermite (2000-2004)

Commission des spécialistes 30^{ème} section UPS :

Pierre Labastie (Président 2000-2004), Carlo Rizzo (vice-président 2001-2004), Jacques Vigué (vice-président Collège A 2005-...), Nicolas Lorente (vice-président Collège B 2005-...), Alberto Beswick (2005-...), Renaud Mathevet (2003-...), Arnaud Le Padellec, Martine Richard-Viard (1998-...), Patrick Moretto-Capelle (2005-...), M. Aziz Bouchène (1993-2004), Cécile Robilliard (2003-2004), Christoph Meier (2001-2003, suppléant depuis 2005), Martine Sence, Valérie Blanchet (suppléante 2005-...), Matthias Büchner (suppléant 2005-..., membre du bureau (assesseur)),

Commission des spécialistes 31^{ème} section UPS : M. Aziz Bouchène (suppléant 2004-...)

Commission des spécialistes 34^{ème} section UPS : Alberto Beswick (suppléant 2004-...)

- *Enseignements* :

Conseil du Département de Physique : Carlo Rizzo, M. Aziz Bouchène

Master de Physique de l'UPS : Alberto Beswick (responsable)

Master 2 « Physique de la matière » : Mohamed Aziz Bouchène (co-responsable)

Licence 1 de Physique : Pierre Labastie (responsable)

Programme d'échange ERASMUS pour le domaine Physique : Carlo Rizzo (responsable 2002-2004), Christoph Meier (responsable depuis 2005)

Agrégation de Physique : Renaud Mathevet (responsable depuis 2005)

- **Autres Universités**

- *Evaluation* :

Commission des spécialistes 30^{ème} section Université Cl. Bernard Lyon I : Jacques Vigué

Commission des spécialistes 30^{ème} section Université de Provence Aix-Marseille : Jacques Vigué

Commission des spécialistes 30^{ème} section Université de Bordeaux 1 : M. Aziz Bouchène

Commission des spécialistes 30^{ème} section Université de Perpignan :

Martine Richard-Viard (2005-...), Nicolas Lorente (2005-...), Christoph Meier (suppléant depuis 2005), Martine Sence (suppléante)

- **Dans des Instances nationales d'évaluation de la recherche**

- CNU 30^{ème} section : Arnaud Le Padellec (2nd vice-président, membre de la Conférence Permanente du CNU), Pierre Labastie (1999-2003), Jacques Vigué (1999-2003), Martine Sence (2003-...)

- CNRS

Comité National Section 04 : Bertrand Girard (membre 1995-2004, membre du bureau 2000-2004), Jean-Marc l'Hermite (2000-2004), Pierre Labastie (membre du bureau 2004-2008)

Jury d'admission CR du département SPM : Bertrand Girard (2001-2003)

Président de Comités d'évaluation : Bertrand Girard (LOA 2004, LIXAM 2005)

Evaluation Bourse Marie Curie : Bertrand Girard (2003-2005), John Weiner (2002-2005)

Expertises pour la mission scientifique, technique et pédagogique : Alberto Beswick, Bertrand Girard, Pierre Labastie, Jacques Vigué,

Expertises pour l'ANR : Alberto Beswick, Bertrand Girard, Pierre Labastie, Jacques Vigué

- **Activité Editoriale**

- « European Physical Journal D » : Jacques Vigué (Co-éditeur du journal 1998-2003)
- « Physical Chemistry Communication » : Alberto Beswick (Membre du bureau éditorial 2000-2003)

- **Organisation de manifestations scientifiques**

- Coloq'8-Horizons de l'Optique : Jacques Vigué (Président du comité local d'organisation, Toulouse septembre 2004)
- Ecole d'été « Coherent Control in Atomic and Molecular Systems Summer School » : Bertrand Girard, (responsable, Cargèse 30 sept-5octobre 2002)
- Colloque « QED 2005, Quantum Vacuum and search for New Forces » : Carlo Rizzo (Coorganisateur et codirecteur des cours, Ecoles des Houche du CNRS, 5-9 juin 2005)
- Ecole Franco-Syrienne « Laser-matter interaction » : M. Aziz Bouchène (organisateur, Université d'El Baath, Homs, 15-20 novembre 2005)

- **Sociétés savantes**

- Comité Française de Physique : Jacques Vigué (membre nommé, 2001- ...)
- Société Française de Physique (SFP) : Valérie Blanchet (secrétaire section locale (2001-2005) et organisatrice des séminaires en Midi-Pyrénées (2001-2003), membre du bureau de la division de Physique Atomique Moléculaire et Optique (PAMO) (2005-...), Arnaud Le Padellec (secrétaire de la division PAMO 2001-2004, membre du CA 2005-...), Jacques Vigué (Président de la Section Locale 2005-2006)
- European Physical Society : Jacques Vigué (membre du bureau de la division de Physique Atomique et Moléculaire)

- **Animation de la communauté scientifique**

Comité de pilotage du réseau des technologies femtoseconde : Béatrice Chatel (membre 2000-2004 puis présidente 2005-2008)

Programmes pluriformations : Bertrand Girard (responsable du PPF « Contrôle des états cohérents » 1999-02, responsable du PPF « Contrôle cohérent et information quantique » 2003-2006)

Conseil Scientifique du Programme National « Physique et Chimie du Milieu Interstellaire » : Bertrand Girard (1996-2002)

GDR « Agrégats » : J.M. L'Hermite (membre du bureau)

GDR « Optique Atomique Intégrée et Nanostructures » : Cécile Robilliard (directrice 2002-2004)

16. La formation dans l'Unité

Le laboratoire a une politique de formation de ses personnels déjà ancienne et dans tous les domaines.

Durant ces quatre dernières années, 27 agents ont participé à 75 sessions de stage de formation :

- Semaine des entrants (ENCRE)
- Technique spécifique (FEMTO, Sciences du vivant et Laser, Optique du champ proche, Rencontre des mécaniciens, Rencontre des électroniciens)
- Electronique : Programmation des micro-contrôleurs, Habilitation électrique
- Informatique (Java, Labview, Linux, Programmation visual Basic 6, CATIA V5)
- Bureautique (Excel, Word mailing, Xlab-Nabuco, Powerpoint, PubliCNRS, EndNote)
- Langue (Anglais, Espagnol, Allemand)
- Web
- Hygiène et Sécurité (Risque et sécurité Laser, Sensibilisation aux risques chimiques, Sauveteur secouriste du travail)
- Réglementation administrative (Délai global de paiement)
- Réglementation européenne (6^{ème} PCRD, Comment rédiger une proposition compétitive)
- Divers (Outils de management, correspondant formation, Journée des entrants, prise de fonction des directeurs de laboratoire)

Cette politique sera poursuivie. En particulier les formations suivantes seront intensifiées :

- CAO mécanique CATIA (1 ingénieur et 2 techniciens)
- Gestion du serveur Web
- Programmation des micro-processeurs
- Langue
- Réglementation administrative

Plusieurs membres du laboratoire sont aussi appelés en tant que formateurs (outils de gestion, lasers femtosecondes).

17. Hygiène et sécurité

17.1. Bilan des accidents ou incidents

Au cours de ces 4 dernières années, un accident de travail s'est produit au sein de notre laboratoire.

- En février 2004, Jean-Christophe DELAGNES, étudiant en thèse dans l'équipe de B. Girard, lors de la manipulation d'un réseau optique sur cette même chaîne laser femtoseconde, a subi un phototraumatisme laser à l'œil gauche. Après une période de 1 an, les divers examens oculaires ont montré une consolidation cicatricielle et une récupération de son acuité visuelle (10/10).

17.2. Identification et analyse des risques

Trois types de risques sont propres à notre laboratoire :

- Risques chimiques liés à la manipulation de solvants de nettoyage et d'alcalins.
- Risques Laser lors du réglage des oscillateurs et lors de la propagation des faisceaux.
- Risques Electriques liés à l'utilisation de hautes tensions.

17.2.1. Risques chimiques

Toutes les manipulations des différents alcalins (Césium-Lithium-Sodium), lors du remplissage des cellules ou des fours, s'effectuent sous boîte à gants à atmosphère contrôlée. La protection propre à ces enceintes est assurée par des poudres d'extinction spécifiques (Markalina) qui peuvent être projetées sur le foyer d'incendie.

Le stockage de ces alcalins est assuré dans des conteneurs spéciaux entreposés dans une pièce réservée et balisée du laboratoire « Salle de chimie ».

Les solvants de nettoyage - alcool éthylique et acétone - sont également entreposés dans un local approprié. Ils sont disponibles en quantité plus réduite pour les équipes ou ateliers.

Une armoire ventilée, proche des salles d'expériences, a été fabriquée pour entreposer des produits chimiques de toxicité aigüe (Azulène, DEA, isoquinoline). Deux hottes de manipulations à filtre à charbon actif équipent deux équipes du laboratoire manipulant ces produits. Un réfrigérateur est entièrement dédié au stockage d'autres produits chimiques.

17.2.2. Risques laser

Les dispositifs classiques de protection des expérimentateurs, en particulier le port de lunettes appropriées, existent sur chaque montage.

Nous avons fait un effort particulier en essayant de mettre sous capotage opaque tous les systèmes laser - oscillateurs et amplificateurs - ainsi que les différents composants où se propagent des faisceaux. Ces caches sont à la fois efficaces vis-à-vis de la lumière parasite émise et de la poussière.

Tout faisceau entre la tête laser et l'expérience se propage dans un tube de PVC, surtout si les distances sont grandes (>50cm).

Pour ce risque laser, un effort important a été fait, et doit être perpétuellement renouvelé, pour l'information des expérimentateurs qui utilisent des lasers, quel que soit le

type et la classe de ces lasers. Il est à noter que les seuls accidents que nous avons eus à déplorer sont liés à l'utilisation expérimentale et en particulier aux réglages des cavités de ces lasers.

17.2.3. Risques électriques

La rénovation des circuits de distribution et des équipements électriques de nos locaux au cours des années 1992 et 1997 a considérablement réduit les risques. L'utilisation de sources ioniques nécessitant l'emploi de hautes tensions est l'objet d'une attention toute particulière des utilisateurs. L'accès à ces dispositifs doit être strictement barré à toute personne étrangère et surveillé pour les intervenants.

Différents systèmes optiques possèdent des composants HT et leur environnement doit être manipulé avec beaucoup de soins.

La connaissance des « coupe-circuits » d'arrêt doit être impérative pour chaque utilisateur d'une salle d'expérience et d'un atelier.

Laurent Polizzi a suivi, cette année, une formation « habilitation électrique ».

En ce qui concerne l'Atelier de Mécanique du laboratoire, conformément aux dernières obligations sur la rénovation des machines-outils, nous avons remis aux normes nos 5 machines (protections mécaniques et électriques). Ces travaux ont été réalisés par nos techniciens et payés sur des crédits PPF de l'IRSAMC.

17.3. Structures Hygiène et Sécurité

Depuis juillet 2005, l'UFR PCA, dont nous dépendons, met en place deux GHS (Groupe Hygiène et Sécurité) dont un spécifique à la chimie de l'UPS et l'autre pour toutes les autres composantes. L'ACMO du laboratoire, Gérard Tréneç devrait être membre de ce GHS. D'autres part, le « document unique » d'évaluation des risques professionnels (ERP), qui est une obligation légale est en cours de finalisation pour le laboratoire.

Ce même ACMO, Gérard Tréneç, est chargé de l'information des personnels sur les activités du CHS de l'Université et du CNRS. Il est le relais entre notre laboratoire et les différentes cellules Hygiène et Sécurité de la Délégation régionale CNRS et de l'Université Paul Sabatier.

Un registre d'hygiène et de sécurité est mis à disposition des personnels au secrétariat du laboratoire.

17.4. Formation des personnels

Un document « Le LCAR Pratique » est remis à chaque entrant dans le laboratoire. Il est source d'informations diverses à la fois sur le fonctionnement de l'Université et du CNRS, ainsi que sur le règlement interne du laboratoire.

Au chapitre « secourisme », il est à noter que Cécile Robilliard et Valérie Blanchet sont secouristes du travail.

17.5. Sécurité et protection du lieu de travail

Enfin, au chapitre « sécurité du bâtiment », un système d'accès au bâtiment 3R1, par carte magnétique, a été mis en place pour la nuit et le week-end par les services techniques de l'Université.

Après une période de mise au point assez longue, ce système d'accès semble donner satisfaction.

18. Séminaires 2002-2005

Le séminaire LCAR est organisé en complément des séminaires IRSAMC. Son but est en priorité de donner l'occasion aux doctorants, visiteurs de passage (dans le cadre de collaborations) et aux candidats sur des postes de chercheurs / enseignants-chercheurs de présenter leurs travaux.

2005

Vendredi 16 décembre 2005

Valérie BLANCHET, LCAR, Toulouse

Time resolved of Spin coherence of excitons in a GaAs/AlGaAs quantum dots and Four Wave Mixing (FWM) beat spectroscopy of excitons in a single quantum well

Vendredi 9 décembre 2005

Jean-Claude DIELS, University of New Mexico, Albuquerque

Interaction Coherente avec des impulsions courtes dans le rubidium

Vendredi 2 décembre 2005

Mathilde FOUCHÉ, LNE-SYRTE/Observatoire de Paris

Horloge optique à atomes froids de strontium

Vendredi 18 novembre 2005

Thierry RUCHON, University of Lund

L'interaction magnétochirale : étude théorique et expérience dans les lasers

Jeudi 17 novembre 2005

Yannick BIDEL, University of Stanford

Condensat de Bose Einstein dans un réseau optique : Amplification paramétrique d'onde de matière Effet Hall Quantique Fractionnaire

Vendredi 1er juillet 2005

Arno RAUSCHENBEUTEL, Universität Bonn

Manipulation d'atomes neutres individuels pour le traitement de l'information quantique

Vendredi 24 juin 2005

Xavier BOUJU, CEMES, Toulouse

Études théoriques de la manipulation de molécules individuelles par sonde locale

Vendredi 3 juin 2005

Liliana ARRACHEA, Instituto de Biocomputacion y Fisica de Sistemas Complejos, Universidad de Zaragoza, Spain

Transport mechanisms in quantum driven systems

Vendredi 20 mai 2005

Jérôme LEVESQUE, STEACIE Institute for Molecular science, Ottawa, Canada
Probing the Electronic Structure of Atoms and Molecules with High Harmonic Generation

Vendredi 1er avril 2005

Dr. Per A. SUNDQUIST, Physical Electronics and Photonics group at the Physics Department of Gothenburg University in Sweden
Spin transition in a few-electron QD and electron tunnelling in complex two- and three-dimensional nanostructures

Vendredi 25 mars 2005

Jean-Christophe DELAGNES, LCAR, Toulouse
Propagation d'impulsions courtes dans les milieux atomiques résonants : observation et contrôle

Vendredi 18 mars 2005

Emmanuel COURTADE, Laboratoire PhLAM, Bat. P5, Université de Lille 1, Villeneuve d'Ascq
Le réseau de pièges annulaires : un nouvel outil pour la physique atomique

Mardi 8 mars 2005

Arnaud ARBOUET, LCAR, Toulouse
Spectroscopie femtoseconde de la dynamique électronique et vibrationnelle de nanoparticules métalliques

Vendredi 4 mars 2005

Guillaume GAY, LCAR, Toulouse
Etude des ouvertures sub-longueur d'onde comme source de pièges optiques pour les atomes

Vendredi 18 février 2005

Sébastien ZAMITH, LCAR, Toulouse
Control of ionisation processes in intense (laser) field Vendredi 4 février 2005

Rudi GRIMM, Inst. of Exp. Physics, Innsbruck University, and Inst. for Quantum Optics and Quantum Information, Austrian Academy of Sciences, Innsbruck, Austria
BEC and more exciting physics with ultracold molecules

Vendredi 21 janvier 2005

Jean-Philippe KARR, ENS, Paris
Mesurer la valeur du rapport Mp/me par spectroscopie vibrationnelle à deux photons de H_2^+

2004

Vendredi 17 décembre 2004

Thomas POLACK, Weizmann Institute, Israel
Contrôle cohérent en régime non-perturbatif avec des impulsions à quadrature unique

Vendredi 3 décembre 2004

Jérémie LEONARD, Université d'Amsterdam et de Strasbourg
Condensats de Bose-Einstein dans un accélérateur linéaire

Vendredi 26 novembre 2004

Pablo ORDEJON RONTHOME, Institut de Ciencia de Materials de Barcelona - CSIC
Electronic transport in Nanostructures from first principles: a simulation tool

Vendredi 19 novembre 2004

Olivier DULIEU, Laboratoire Aime Cotton - Paris
Formation de molécules dipolaires ultrafroides par photoassociation.

Vendredi 12 novembre 2004

Christophe SALOMON, ENS - Paris
Gaz de Fermi ultra-froids : du condensat de Bose-Einstein de molécules aux paires de Cooper.

Vendredi 5 novembre 2004

Jocelyne GUENA, ENS - Paris
L'expérience de Violation de la Parité de l'ENS : Mesure, à la précision de 2.7%, d'un dipôle de transition de 10-11 unités atomiques (eao)

Vendredi 29 octobre 2004

Timus TSCHERBUL, Moscow State University, Russie et University of Perugia, Italie
Direct determination of the lifetime and total angular momentum dependence of reactive scattering resonances: the F+H₂ reaction

Vendredi 15 octobre 2004

Chris WESTBROOK, IOTA, Orsay
La puce à atomes: un laboratoire sur un centimètre carré (mis apart...)

Vendredi 24 septembre 2004

James LISY, University of Illinois, Urbana-Champaign, IL, USA
Competitive non-covalent interactions in ionic clusters

Jeudi 17 juin 2004

Kenji OHMORI, Institute for Molecular Science, National Institutes of Natural Sciences, Japan
Molecular Wave-Packet Interferometry: How Does It Work?

Vendredi 11 juin 2004

Giovanni CANTATORE, Università di Trieste, Istituto Nazionale Fisica Nucleare e Subnucleare, Sezione di Trieste, Italia
Experimental study of the "vacuum element" with PVLAS

Vendredi 21 mai 2004

Edouardo HERNANDEZ, Institut de Ciencia de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC)
Atomistic Simulation of the Phase Diagram of Silicon

Vendredi 7 mai 2004

Nicolas NIEUWJAER, LCAR
Transfert de charge au cours de la diffusion rasante d'ions sur une surface de cuivre propre ou exposée à l'oxygène : effets cinématiques et variations azimuthales

Vendredi 30 avril 2004

Alexei BUCHACHENKO, Université d'Etat de Moscou

Collision-induced non-adiabatic transitions in the ion-pair states of I₂ molecule

Vendredi 2 avril 2004

Marie-Laure BOCQUET, Laboratoire de Chimie UMR 5182, ENS Lyon

Vers des simulations STM réalistes de molécules sur métaux

Vendredi 26 mars 2004

Arnaud RENTENIER, Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité

Spectroscopie des électrons et fragmentation du C₆₀

Vendredi 12 mars 2004

Riccardo RURALI, Post-Doctorant, Laboratoire LCAR

Theoretical modelling of defects in silicon carbide

Vendredi 12 mars 2004

P. CABRERA-SANFELIX, Surface Science Research Centre, Department of Chemistry, University of Liverpool

Adsorption and Dissociation of Water on Graphite surfaces

2003

Vendredi 12 décembre 2003

Professor WONHO-JHE, (Seoul National University) Director, Center for Near-field Atom-photon Technology

Nonlinear Dynamics of Cold Atoms and Its Aspects of Condensed Matter Physics

Vendredi 5 décembre 2003

Adam WALTERS, CESR Toulouse

Radioastronomie à haute résolution spectrale et besoins en données moléculaires ; le domaine de l'infrarouge lointain, l'observatoire spatial Herschel et le projet CASSIS

Jeudi 27 novembre 2003

Rob COALSON, Département de Chimie, Université de Pittsburgh, USA

Theory of Laser-Controlled Electron Transfer

Jeudi 16 octobre 2003

Ingo FISCHER, Institut de Chimie-Physique, , Université Würzburg, Allemagne

The Photochemistry of Radicals, Clusters and Biomolecules

Vendredi 10 octobre 2003

Arnaud DUPAYS, Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité, Toulouse

Etude théorique du transfert de muon entre atomes

Vendredi 26 septembre 2003

Laetitia SOUKIASSIAN, Laboratoire de Photophysique Moléculaire, ORSAY

Excitation par Electrons Tunnel de Nano-Objets Individuels adsorbés sur la Surface de Si(100)

Vendredi 27 juin 2003

Anders HELLMAN, Applied Physics Chalmers University of Technology, Göteborg, Suède
Adiabatic and diabatic aspects of adsorption on metals

Vendredi 13 juin 2003

Francisco J. GARCIA-VIDAL, Departamento de Fisica Teorica de la Materia Condensada, Universidad Autonoma de Madrid
Extraordinary Optical Properties of Nanostructured Metals

Vendredi 13 juin 2003

Andrew J. MAYNE, Laboratoire de Photophysique Moléculaire, Orsay
Diamond under the Microscope.

Jeudi 22 mai 2003

Cécile CORRIOL, Surface Science Research Centre, Department of Chemistry, The University of Liverpool
Analyses classiques et quantiques de la dynamique des mécanismes de transfert de charges dans les interactions molécules-surfaces.

Jeudi 17 Avril 2003

Carsten HENKEL, Institut fur Physik, Universitat Potsdam, Allemagne
Towards integrated atom optics: good and bad electromagnetic fields

Vendredi 14 Mars 2003

Eduardo ANGLADA, Dep. de Fisica de la Materia Condensada , Universidad Autonoma de Madrid, Spain
Efficient mixed-force first-principles molecular dynamics

Vendredi 24 janvier 2003

Stefan HAACKE, Université de Lausanne
Processus femtoseconde et biophysique : Exemple des protéines de rétinol

Lundi 6 janvier 2003

Yannick BIDEL, Laboratoire Ondes et Desordre, Sophia Antipolis
Rétrodiffusion cohérente de la lumière par un gaz d'atomes froids

2002

Vendredi 13 décembre 2002

Jean-Christophe DELAGNES et Antoine MONMAYRANT, LCAR-IRSAMC, Université Paul Sabatier, Toulouse
Spectroscopie terahertz et applications. Caractérisation d'impulsions femtosecondes : nouvelle méthode utilisant un dispositif de mise en forme d'impulsion

Vendredi 6 décembre 2002

Fernando MARTIN, Madrid University, Spain
Charge Transfer and Evaporation in Low Energy Collisions of Metal Clusters and C60 with Atomic Targets

Vendredi 15 novembre 2002

Bengt Ingemar LUNDQVIST, Dep. Applied Physics Chalmers and Göteborg Universities
Van der Waals density functional and excitation potentials for hard and soft materials and sticking

Vendredi 4 octobre 2002

M. BRANDBYGE, Mikroelektronik Centret (MIC), Technical University of Denmark (DTU)
Density functional method for non-equilibrium electron transport

Vendredi 27 septembre 2002

J.M. LAUNAY, Université de Rennes 1
Dynamique quantique des collisions Na + Na₂ à ultra-basse température

Vendredi 13 septembre 2002

E. J. AIZPURUA, National Institute of Standards and Technology
Tunnel-coupled quantum dots : Atomistic Theory of Quantum Dot Molecules and Arrays

Jeudi 5 septembre 2002

Gustav GERBER, Würzburg
Optimal control of chemical reactions

Lundi 8 juillet 2002

Giorgio TURRI, Lawrence Berkeley National Lab
Electronic Correlations as a tool for the Complete Photoemission Experiment

Vendredi 31 mai 2002

Silvana RADESCU, Université de La Laguna, Espagne
Evaluation quantitative du degré d'ordre-désordre dans les transitions structurales de phase et étude de la stabilité des phases dans les matériaux à haute pression

Jeudi 2 mai 2002

Franck GOBET, Ecole Normale Supérieure de Lyon
Fragmentation d'agrégats moléculaires et changement d'état d'un système de taille finie

Vendredi 12 avril 2002

Clemens WOYWOD, Technical University, Munich
Simultaneous Jahn-Teller- and Pseudo-Jahn-Teller Coupling in the Photoelectron Spectrum of Ammonia

Vendredi 22 mars 2002

Richard BERNDT, Christian-Albrechts-Universität Kiel
Dynamics and Manipulation of Two-Dimensional Electronic States

Lundi 18 mars 2002

Richard BERNDT, Christian-Albrechts-Universität Kiel
Scanning tunnelling spectroscopies

Vendredi 1er mars 2002

Marcus MOTZKUS, Max-Planck Institut für Quantenoptik Garching

Coherent control of molecular quantum phenomena with shaped femtosecond pulses

Vendredi 8 Février 2002

Mathias HEDOUIN, Université de Birmingham

Density functional calculations of Chemisorption and STM images of C₆H_n, n=4,5, and 6, on Cu(100)

