

# Calcul de cartes de résonances de photodissociation par une méthode d'opérateur d'onde adaptatif.

**Arnaud Leclerc<sup>1\*</sup>**, Georges Jolicard<sup>2</sup>, Osman Atabek<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Université de Lorraine, CNRS, Lab. de Physique et Chimie Théoriques, UMR7019, 57000 Metz

<sup>2</sup>Institut UTINAM UMR CNRS 6213, Observatoire de Besançon, 25010 Besançon Cedex

<sup>3</sup>Université Paris-Saclay, CNRS, Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, 91405 Orsay

\*Arnaud.Leclerc@univ-lorraine.fr

## RESUME

Les états de résonance jouent un rôle important dans la dynamique de molécules contrôlées par laser [1]. Les effets d'une impulsion laser intense sont souvent multiphotoniques, non-linéaires et leur maîtrise nécessite une connaissance approfondie de ces états, dont la durée de vie dépend fortement des paramètres du laser (fréquence et éclairement). Le spectre de résonance, issu de la diagonalisation d'un Hamiltonien de Floquet non hermitien, possède une structure qui permet d'envisager des stratégies originales de contrôle optique de molécules froides [2,3], en particulier en offrant la possibilité de mettre en évidence des états exotiques, tels des résonances de largeur nulle (ZWR), ou des points exceptionnels (EP).

Ces objectifs ont stimulé le développement d'une méthode numérique originale de diagonalisation itérative, fondée sur la théorie des opérateurs d'onde adaptatifs [4]. Cette approche permet de suivre un sous-espace propre d'un Hamiltonien, éventuellement de grande dimension ou non-hermitien, et qui dépend continuellement de paramètres externes ajustables (ou de paramètres adiabatiques lents). En l'occurrence, les paramètres considérés étaient la fréquence et l'intensité du laser de contrôle.

La méthode s'avère très précise numériquement et compétitive avec des algorithmes standard du type Davidson. Par ailleurs le coût en mémoire de la méthode des opérateurs d'onde adaptatifs reste parfaitement constant au cours des itérations. La méthode a été appliquée au calcul de cartes de valeurs propres de résonance de photodissociation pour l'ion moléculaire  $H_2^+$ , au voisinage de points exceptionnels.

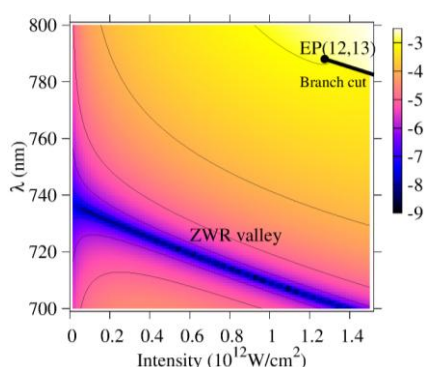


Figure 1. Carte de la largeur de la résonance issue de l'état vibrationnel  $\nu=12$  de  $H_2^+$ , dans le plan des paramètres du laser (éclairement-longueur d'onde). L'échelle de couleur représente  $\log_{10}(\Gamma/2)$ .

Les auteurs remercient le GDR ThéMS 3575 du CNRS pour son soutien scientifique et son aide financière.

## Références

- [1] A. Leclerc, D. Viennot, G. Jolicard, R. Lefebvre et O. Atabek, J. Phys. B: At. Mol. Opt. **50**, 234002 (2017)
- [2] A. Leclerc, D. Viennot, G. Jolicard, R. Lefebvre et O. Atabek, Phys. Rev. A **94**, 043409 (2016)
- [3] R. Lefebvre et O. Atabek, Phys. Rev. A **101**, 063406 (2020)
- [4] A. Leclerc et G. Jolicard, J. Chem. Phys. **152**, 204107 (2020)