

Chapitre IV

Les atomes de Rydberg circulaires en interaction : vers un simulateur quantique

La bonne compréhension des interactions entre atomes de Rydberg sphériques permet d'imaginer leur utilisation comme plateforme de simulation quantique. Un premier obstacle majeur s'oppose à cette idée. La préparation d'une chaîne régulière d'atomes de Rydberg dans le niveau 60S en s'appuyant sur le mécanisme d'excitation facilitée paraît difficile [29].

Nous présentons ici une proposition de simulateur quantique fondé sur des atomes de Rydberg circulaires piégés par laser. Cette proposition est ébauchée dans la thèse de Thanh Long Nguyen [29] et l'article [37] en discute les points essentiels.

Le simulateur proposé repose sur les interactions entre atomes de Rydberg circulaires. Après avoir présenté le principe général du simulateur, nous dirons quelques mots des interactions entre atomes de Rydberg circulaires en présence d'un champ électrique et d'un champ magnétique externe, en complément de I.3.5. Ces interactions permettent de simuler le hamiltonien « XXZ » d'une chaîne de spins 1/2, que nous présenterons. Nous terminerons ce chapitre avec une discussion des points techniques nécessaires à la réalisation d'un tel simulateur : le piégeage laser des atomes de Rydberg circulaires, l'allongement de leur durée de vie par inhibition de l'émission spontanée et la préparation déterministe d'une chaîne de tels atomes.

IV.1 Principe général du simulateur

Le simulateur quantique que nous proposons est schématisé en figure IV.1. Des atomes de Rydberg circulaires sont piégés par un potentiel pondéro-moteur créé par des faisceaux laser de longueur d'onde $\lambda = 1064\text{ nm}$. Le confinement radial sur l'axe Ox est assuré par un faisceau « creux » présentant un profil d'intensité de Laguerre-Gauss. Le confinement longitudinal est assuré par un réseau unidimensionnel ajustable, formé par l'interférence de deux faisceaux se propageant dans le plan xOy , présentant des angles petits et opposés par rapport à l'axe Oy . La variation de cet angle peut mener à un pas de réseau de $r = 5$ ou $7\text{ }\mu\text{m}$ par exemple, ces deux valeurs correspondant respectivement à un régime d'interaction dipôle-dipôle forte ou modérée. Le principe

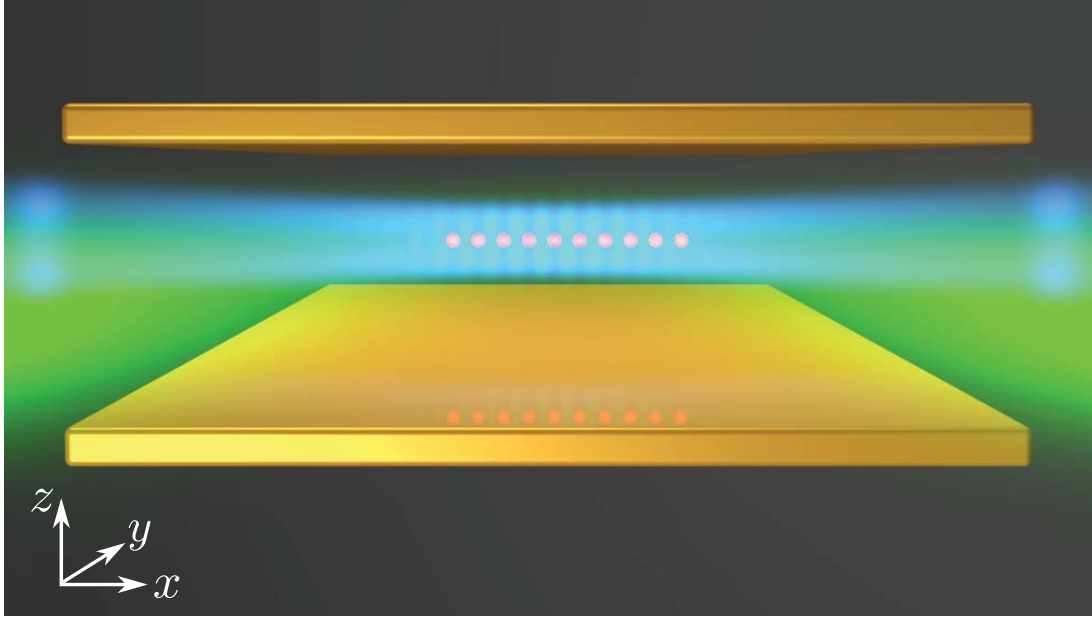


Figure IV.1 Schéma de principe du simulateur quantique proposé. Les atomes de Rydberg circulaires, représentés par les sphères rouges, sont placés dans un condensateur et piégés dans des faisceaux laser : un faisceau « creux » selon l'axe Ox , représenté en bleu, et un réseau ajustable créé par l'interférence de deux faisceaux quasi-parallèles, représentés en vert.

du piégeage pondéro-moteur des atomes de Rydberg circulaires, ainsi que la géométrie des lasers de piégeage, seront discutés en IV.4.1.

Les atomes de Rydberg circulaires piégés sont placés à l'intérieur d'un condensateur formé par deux électrodes planes parallèles au plan xOy . En premier lieu, cela inhibe l'émission spontanée σ^+ du niveau circulaire nC vers le niveau circulaire $(n-1)C$. Comme nous l'avons vu en I.2.2, ce canal d'émission est largement responsable de la durée de vie finie des niveaux circulaires. L'inhibition de ce canal par le condensateur permettra d'accroître significativement la durée de vie des niveaux de Rydberg, jusqu'à des temps de l'ordre de la centaine de secondes. Le temps de vie des atomes circulaires dans un tel condensateur sera discuté en IV.4.2. Le condensateur permet en second lieu, d'imposer un champ électrique statique homogène selon l'axe Oz .

Une technique analogue au refroidissement évaporatif, reposant sur les interactions répulsives entre atomes de Rydberg, permet de préparer de façon déterministe une chaîne régulière de plusieurs dizaines d'atomes de Rydberg circulaires. À la fin d'une simulation, les atomes de Rydberg pourront être détectés un par un grâce à cette même technique, qui sera discutée en IV.4.3.

Les états de spin $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ sont encodés sur les états de Rydberg circulaires $50C$ et $48C$ respectivement. Ces deux états sont couplés par une transition microonde à deux photons. L'interaction dipôle-dipôle est alors analogue à un hamiltonien XXZ pour une chaîne de spins $1/2$ en interaction avec leurs plus proches voisins. Le contrôle des champs électrique et magnétique ainsi que de la source microonde couplant les deux niveaux de Rydberg autorisent un contrôle précis et rapide du hamiltonien simulé, sur une large gamme de paramètres. Cette analogie entre atomes de Rydberg circulaires

et spins 1/2 est établie en IV.2, où nous discuterons le choix des niveaux 50C et 48C ainsi que le contrôle du hamiltonien et le diagramme de phase qui en découle.

IV.2 Les interactions dipôle-dipôle entre atomes de Rydberg circulaires

Les interactions dipôle-dipôle entre atomes de Rydberg circulaires sont au cœur de notre proposition de simulateur. Comme nous l'avons mentionné en I.3.5, la présence d'un champ électrique externe permet de fixer un axe de quantification, et donc de fixer l'orientation des orbites de grand moment cinétique. Dans la présente discussion, nous considérerons que les atomes de Rydberg circulaires sont placés sur un axe Ox , perpendiculaire au champ directeur selon Oz , tels que représentés en figure (I.14).

IV.2.1 Les niveaux circulaires en présence de champs électrique et magnétique

En présence d'un champ électrique, les niveaux à grand moment cinétique d'une même multiplicité voient leur dégénérescence partiellement levée. Le diagramme d'énergie de ces niveaux est représenté en figure (IV.2a)). Le niveau circulaire est noté $|nC\rangle$ et les deux niveaux « elliptiques » voisins sont notés $|nE^\pm\rangle = |n, m = n - 2, k = \pm 1\rangle$. De la même façon, les niveaux de $m = n - 3$ sont notés $|nEE^0\rangle = |n, m = n - 3, k = 0\rangle$ et $|nEE^\pm\rangle = |n, m = n - 3, k = \pm 2\rangle$.

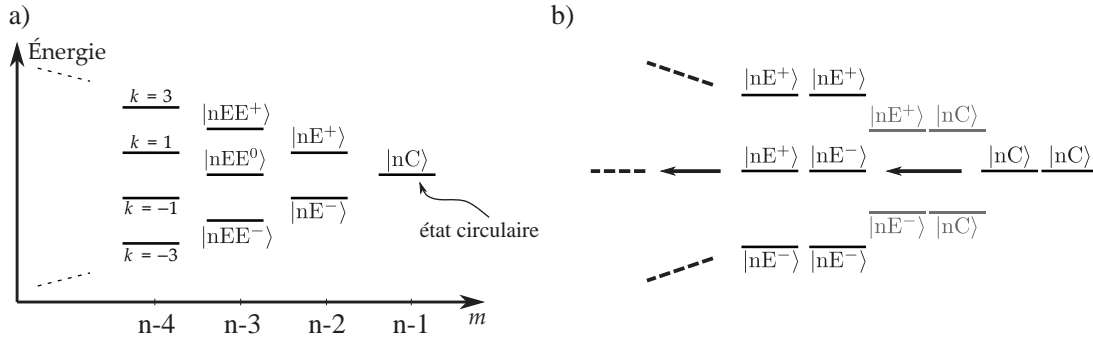


Figure IV.2 a) Diagramme d'énergie des niveaux proches de nC , en présence d'un champ électrique. b) Diagramme d'énergie des niveaux de paire proches de $|nC\rangle|nC\rangle$ en présence d'un champ électrique. Le champ électrique est dirigé selon Oz , perpendiculaire au vecteur qui sépare les deux atomes de la paire, dirigé selon Ox .

Il s'agit maintenant de comprendre quelle forme prend l'interaction dipôle-dipôle dans le cas présent. Replaçons nous dans le cas de deux atomes séparés d'une distance r . En I.3 nous avons exprimé, en l'absence de champ électrique extérieur, le hamiltonien de couplage dans la base des harmoniques sphériques (cf. équation (I.27)). De plus, l'axe de quantification était alors déterminé par le vecteur séparant la paire d'atomes en interaction. Ici au contraire, l'axe de quantification est déterminé par le champ électrique extérieur, selon Oz donc, et le vecteur séparant les atomes sont situés sur l'axe Ox , à des positions $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ respectivement. Le hamiltonien d'interaction dipôle-

dipôle prend alors la forme

$$\hat{V}_{dd} = -\frac{q^2 \hat{r}_1 \hat{r}_2}{3\epsilon_0 r^3} \left[Y_1^0 Y_1^0 + \frac{1}{2} (Y_1^{+1} Y_1^{-1} + Y_1^{-1} Y_1^{+1}) - \frac{3}{2} (Y_1^{+1} Y_1^{+1} + Y_1^{-1} Y_1^{-1}) \right], \quad (\text{IV.1})$$

où les Y_l^m sont les harmoniques sphériques. On remarque ici que le moment magnétique total de la paire atomique n'est plus nécessairement conservé par l'interaction dipôle-dipôle. Ainsi le niveau de paire $|nC, nC\rangle$ se trouve couplé de façon quasi résonante avec le niveau de paire $|nE^+, nE^-\rangle$, lui-même couplé aux niveaux de paire $|nEE^+, nEE^-\rangle$ et $|nEE^0, nEE^0\rangle$, et ainsi de suite. La figure (IV.2 b) représente les niveaux de paire proches du niveau $|nC, nC\rangle$ en présence d'un champ électrique.

Ces couplages quasi résonants, dès lors que la distance entre les atomes est suffisamment petite, perturbent le niveau $|nC, nC\rangle$ en le mélangeant aux niveaux de paires d'énergie suffisamment proche. C'est ce que nous avons vu en I.3.5 : en figure (I.15), lorsque les deux atomes de la paire sont plus proches que $10\mu\text{m}$, l'état propre du hamiltonien complet s'éloigne du niveau non perturbé $|50C, 50C\rangle$. Cet effet de mélange a plusieurs conséquences néfastes. Tout d'abord, l'interaction dipôle-dipôle ne peut plus être simplement représentée par un déplacement d'énergie en $1/r^6$ entre deux atomes dans un niveau de paire $|n, k, m\rangle |n, k, m\rangle$. De plus, le mélange avec les niveaux elliptiques réduit le temps de vie du niveau de paire à deux atomes circulaires. En effet, les niveaux elliptiques peuvent être désexcités par des transitions π vers la multiplicité inférieure alors que le niveau circulaire ne peut être désexcité que par une transition σ^+ . Or le dispositif d'inhibition de l'émission spontanée que nous proposons, qui sera discuté en IV.4.2, ne peut inhiber que l'émission spontanée σ^+ . Ainsi donc, le gain de temps de vie permis par ce dispositif est perdu dès lors que des transitions π sont accessibles.

Afin de contourner cette difficulté, il faut trouver un moyen de lever la dégénérescence des niveaux de paire non perturbés représentés en figure (IV.2 b). Deux paramètres sont à notre disposition pour ce faire. Le premier est la valeur du champ électrique. Les niveaux de paire non perturbés sont d'autant plus distants en énergie que le champ électrique est élevé. Cependant, la variation du champ électrique nous servira à faire varier l'interaction elle-même comme nous l'expliquerons en ???. Le second moyen dont nous disposons est l'imposition d'un champ magnétique extérieur B_z , orienté selon Oz , qui déplacera les niveaux par effet Zeeman.

Le hamiltonien Zeeman pour un état circulaire prend la forme

$$\hat{H}_Z = \mu_B g_l \hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B} = \mu_B g_l \hat{L}_z B_z, \quad (\text{IV.2})$$

où μ_B est le magnéton de Bohr et g_l le facteur de Landé pour le nombre quantique orbital l . Dans la mesure où l'on néglige le spin de l'électron, qui est très petit devant l ($s = 1/2 \ll l \simeq 50$), le facteur de Landé peut être approximé à $g_l \simeq -1$. Ce hamiltonien conserve le nombre quantique magnétique m , qui n'est autre que la valeur propre de l'opérateur \hat{L}_z^* . Tant que le champ magnétique B_z reste suffisamment petit, l'effet Zeeman agit comme une perturbation au premier ordre du hamiltonien (I.8) de l'atome dans un champ électrique. La seule conséquence de l'effet Zeeman sur le niveau $|n, m, k\rangle$

*. Si le champ magnétique avait des composantes non nulles selon Ox et Oy , celles-ci coupleraient des états de m différents.

sera un déplacement d'énergie

$$\Delta E_Z(n, m, k) = \langle n, m, k | g_L \hat{L}_z | n, m, k \rangle \cdot \mu_B B_z \simeq m \cdot \mu_B B_z = \Delta E_Z(m). \quad (\text{IV.3})$$

Le niveau de paire $|n, m, k; n, m', k'\rangle$ sera déplacé de la somme du déplacement d'énergie de $|n, m, k\rangle$ et $|n, m', k'\rangle$, soit $(m + m')\mu_B B_z$.

En tenant compte de l'effet Stark (cf. équation (I.23)) et de l'effet Zeeman perturbatif, on obtient les énergies suivantes pour les niveaux circulaires et elliptiques de la multiplicité n :

$$\begin{aligned} E_{nC}/2E_I &= -\frac{1}{2n^2} - \frac{1}{16}n^4(8n^2 + 18n + 10)|\mathbf{F}|^2 \left(\frac{ea_0}{2E_I}\right)^2 + (n-1)\mu_B B_z \\ &= -\frac{1}{2n^2} - \alpha_{nC}|\mathbf{F}|^2 + (n-1)\mu_B B_z, \\ E_{nE\pm}/2E_I &= -\frac{1}{2n^2} \pm \frac{3n}{2}|\mathbf{F}|\frac{ea_0}{2E_I} - \frac{1}{16}n^4(8n^2 + 36n - 20)|\mathbf{F}|^2 \left(\frac{ea_0}{2E_I}\right)^2 + (n-2)\mu_B B_z \\ &= -\frac{1}{2n^2} \pm \frac{ea_0}{2E_I} \frac{3n}{2}|\mathbf{F}| + \alpha_{nE\pm}|\mathbf{F}|^2 + (n-2)\mu_B B_z, \end{aligned} \quad (\text{IV.4})$$

où les coefficients α d'effet Stark quadratique sont introduits pour simplifier l'écriture.

Appliquons les équations (IV.4) à l'exemple des états de paire non perturbés $|50C, 50C\rangle$ et $|50E^+, 50E^-\rangle$. Dans les conditions du paragraphe I.3.5, c'est-à-dire sous 1 V/cm et sans champ magnétique, la distance en énergie entre ces deux états de paire est de $\Delta E = h \times 169$ kHz. Si l'on ajoute un champ magnétique B_z de 10 G = 1 mT, la distance en énergie devient $\Delta E = h \times 28,17$ MHz, soit presque 200 fois plus. Un faible champ magnétique nous permet ainsi de lever la dégénérescence entre les niveaux de paire voisins de $|nC, nC\rangle$.

IV.2.2 L'interaction circulaire-circulaire en présence de champs électrique et magnétique extérieurs

Dans les condition que nous venons d'établir il nous est possible de calculer l'interaction dipôle-dipôle entre deux atomes circulaires, tout en limitant la perturbation de ces niveaux qui serait due à un couplage résonant. Ce calcul s'effectue de la même façon qu'en I.3, en diagonalisant le hamiltonien complet de la paire atomique[†]. Ce hamiltonien complet s'écrit

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{V}_{dd}(\mathbf{r}) \\ &= \hat{H}_{0,1} + \hat{H}_{0,2} + \hat{H}_{S,1} + \hat{H}_{S,2} + \hat{H}_{Z,1} + \hat{H}_{Z,2} + \hat{V}_{dd}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (\text{IV.5})$$

où $\hat{H}_{0,i}$, $\hat{H}_{S,i}$, $\hat{H}_{Z,i}$ sont respectivement les hamiltoniens libre, Stark et Zeeman de l'atome i et \hat{H}_i le hamiltonien total de l'atome i isolé.

Nous pouvons, ici encore, écrire l'interaction entre un atome dans le niveau nC et

[†]. La même méthode permet tout aussi bien de calculer l'interaction entre deux atomes dans des niveaux différents, de même qu'en I.3.

un atome dans le niveau $n'C$ comme un hamiltonien effectif

$$V_{eff}/h = \begin{pmatrix} C_{nC,n'C} & A_{nC,n'C} \\ A_{nC,n'C} & C_{nC,n'C} \end{pmatrix} \quad (\text{IV.6})$$

où $C_{nC,n'C}$ et $A_{nC,n'C}$ sont respectivement les termes d'interaction directe et d'échange entre les niveaux nC et $n'C$. De manière générale, ces termes se décomposent en une composante « van der Waals » en $1/r^6$ et une composante de couplage direct en $1/r^3$. De plus, ils dépendent désormais fortement des champs électrique et magnétique imposés.

Reprenons l'exemple d'une paire $|50C, 50C\rangle$. Les deux atomes étant dans le même état, l'interaction se limitera aux termes diagonaux du hamiltonien (IV.6) et aucune interaction d'échange n'aura lieu. Dans le paragraphe I.3.5, sans champ magnétique extérieur et sous 1 V/cm, le niveau de paire se mélangeait dès que la distance entre les deux atomes était inférieure à 10 μm . Le résultat de ce calcul est à nouveau présenté en figure (IV.3 a). En refaisant le calcul avec un champ magnétique $B_z = 10$ G, on obtient la courbe d'énergie présentée en figure (IV.3 b). Alors qu'en l'absence de champ

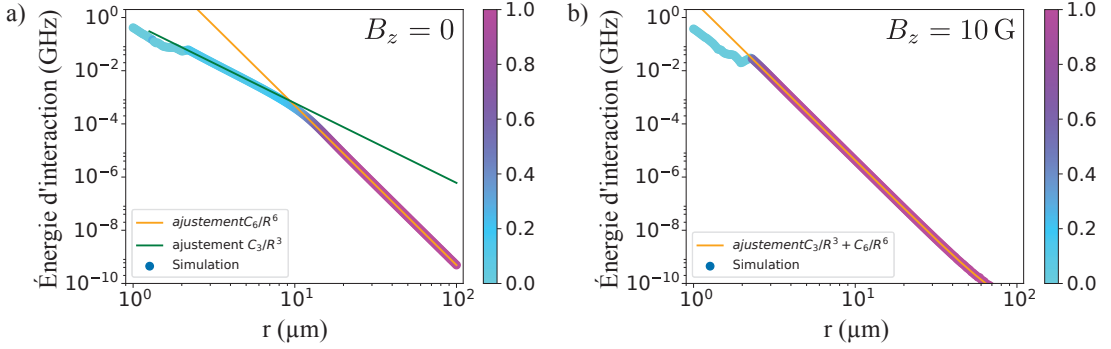


Figure IV.3 Déplacement en énergie de la paire 50C-50C par interaction dipolaire. Les deux atomes sont placés côte à côte sur l'axe Ox , sous un champ électrique de 1 V/cm selon l'axe Oz . L'échelle de couleur représente le carré de la projection sur l'état non perturbé $|50C, 50C\rangle$ de l'état propre du hamiltonien qui le suit adiabatiquement. **a)** Sans champ magnétique extérieur et **b)** avec un champ magnétique $B_z = 10$ G selon Oz .

magnétique le niveau de paire circulaire-circulaire était perturbé dès que la distance entre les deux atomes était inférieure à 10 μm , un champ magnétique de 10 G selon Oz permet d'éviter cet effet. L'énergie d'interaction évolue ainsi en $1/r^6$ pour les distances supérieures à 2 μm . Cependant, l'interaction est rendue moins forte. En effet, un ajustement en $1/r^6$ donne un coefficient de van der Waals $C_{6,50C-50C}(10\text{ G}) = 4,45\text{ GHz } \mu\text{m}^6$ au lieu de 489,18 $\text{GHz } \mu\text{m}^6$ en champ magnétique nul. Cela s'explique par le fait que le couplage dipolaire second de ordre varie comme l'inverse des distances en énergie entre le niveau de paire considéré et les niveaux médiateurs du couplage. Le champ magnétique ayant pour effet de déplacer les niveaux de paire de façon à supprimer les couplages quasi résonants, il s'en suit que les distance en énergie entre niveaux de paire sont augmentées et l'interaction d'autant diminuée.

En raison de cette réduction du coefficient de van der Waals C_6 , l'interaction à grande distance n'est plus dominée par les couplages de second ordre en $1/r^6$, mais par des couplages de premier ordre en $1/r^3$. Il devient donc nécessaire, afin de bien décrire l'évolution de l'énergie d'interaction à grande distance, de l'ajuster à une forme mixte en

$C_3/r^3 + C_6/r^6$. Un tel ajustement est présenté en figure (IV.3 b). Il donne les coefficients $C_{6,50C-50C}(10\text{ G}) = 4,23\text{ GHz }\mu\text{m}^6$ et $C_{3,50C-50C}(10\text{ G}) = 1,02 \cdot 10^{-5}\text{ GHz }\mu\text{m}^3$. Dans les discussions qui suivent, nous nous limiterons à des distances inter-atomiques de l'ordre de $5\mu\text{m}$, et omettrons par conséquent d'indiquer cette composante en $1/r^3$ de l'interaction, qui n'est importante qu'à grande distance.

Dans le cas d'une paire d'atomes dans l'état $|nC, n'C\rangle$ avec $n' \neq n$, une interaction d'échange décrite par le coefficient $A_{nC, n'C}$ aura lieu, en plus de l'interaction directe décrite par le coefficient $C_{nC, n'C}$. Celle-ci permet d'envisager la simulation d'un ensemble de spins $1/2$.

IV.3 Le hamiltonien XXZ simulé

IV.3.1 Équivalence avec une paire de spins $1/2$

Étant donné que nous souhaitons simuler une chaîne de spins $1/2$, il nous faut étendre la base des états accessibles. L'état d'un spin $1/2$ est décrit sur la base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ et l'état d'une paire de spins $1/2$ est décrit sur la base $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$. Ainsi en encodant le spin sur des états de Rydberg circulaires par l'équivalence $|\uparrow\rangle = |nC\rangle, |\downarrow\rangle = |n'C\rangle$, le hamiltonien d'interaction de la paire de spin doit être étendu à la base $\{|nC, nC\rangle, |nC, n'C\rangle, |n'C, nC\rangle, |n'C, n'C\rangle\}$. Sur cette base, le hamiltonien d'interaction prend la forme

$$\hat{V}_{eff}/h = \begin{matrix} & |nC, nC\rangle & |nC, n'C\rangle & |n'C, nC\rangle & |n'C, n'C\rangle \\ \begin{matrix} \langle nC, nC| \\ \langle nC, n'C| \\ \langle n'C, nC| \\ \langle n'C, n'C| \end{matrix} & \begin{pmatrix} C_{nC, nC} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_{nC, n'C} & A_{nC, n'C} & 0 \\ 0 & A_{nC, n'C} & C_{nC, n'C} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{n'C, n'C} \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (\text{IV.7})$$

Nous souhaitons écrire ce hamiltonien sur la base des opérateurs de spin. Pour chacun des spins, ces opérateurs sont décrits sur la base de l'identité et des matrices de Pauli $\{\mathbb{1}, \sigma^\alpha\}_{\alpha=x,y,z}$. Afin d'agir sur l'espace produit tensoriel de deux spins, il nous faut définir les opérateurs suivants

$$\begin{aligned} \sigma_1^\alpha &= \sigma^\alpha \otimes \mathbb{1} \\ \sigma_2^\alpha &= \mathbb{1} \otimes \sigma^\alpha \end{aligned} \quad (\text{IV.8})$$

où l'indice 1 ou 2 indique sur quel atome agit l'opérateur. La famille formée par les produits matriciels deux à deux de ces opérateurs $\mathbb{1}^\ddagger$ et σ_i^α permet de générer tous les opérateurs agissant sur la paire de spins. Nous pouvons ainsi réécrire le hamiltonien

‡. Nous omettons délibérément la dimension de l'espace sur lequel agit l'opérateur d'identité. Celui-ci devrait en toute rigueur s'écrire $\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} = \mathbb{1}^{\otimes 2}$.

d'interaction (IV.7) sous la forme

$$\begin{aligned} \hat{V}_{eff}/h &= \delta E \mathbb{1} + \frac{\delta\zeta}{2} (\sigma_1^z + \sigma_2^z) + J_z (\sigma_1^z \sigma_2^z) + J (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) \\ &= \begin{pmatrix} \delta E + \delta\zeta + J_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \delta E - J_z & 2J & 0 \\ 0 & 2J & \delta E - J_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \delta E - \delta\zeta + J_z \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{IV.9})$$

où l'on identifie :

$$\begin{cases} \delta E = (C_{nC,nC} + 2C_{nC,n'C} + C_{n'C,n'C}) / 4, \\ \delta\zeta = (C_{nC,nC} - C_{n'C,n'C}) / 2, \\ J_z = (C_{nC,nC} - 2C_{nC,n'C} + C_{n'C,n'C}) / 4, \\ J = A_{nC,n'C} / 2. \end{cases} \quad (\text{IV.10})$$

Notons que le terme $\delta E \mathbb{1}$ ne fait que redéfinir l'origine des énergies, et peut donc être ignoré. Le hamiltonien d'interaction de la paire devient ainsi

$$\hat{V}_{eff,2 \text{ atomes}}/h = \frac{\delta\zeta}{2} (\sigma_1^z + \sigma_2^z) + J_z (\sigma_1^z \sigma_2^z) + J (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y). \quad (\text{IV.11})$$

IV.3.2 Extension à une chaîne de N atomes et habillage microonde

Le hamiltonien d'interaction à deux atomes s'étend facilement à une chaîne de N atomes régulièrement espacés d'une distance r et numérotés de 1 à N . Nous pouvons ici négliger les interactions au-delà du premier voisin. En effet, dès lors que les termes d'interaction évoluent en $1/r^6$, la contribution d'un second voisin est 64 fois plus petite que celle des premiers voisins. Le hamiltonien d'interaction d'une telle chaîne de spin s'écrit alors, en généralisant le hamiltonien à deux atomes (IV.11),

$$\hat{V}_{eff,N}/h = \frac{\delta\zeta}{2} (\sigma_1^z + \sigma_N^z) + \delta\zeta \sum_{i=2}^{N-1} \sigma_i^z + J_z \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + J \sum_{i=1}^{N-1} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y), \quad (\text{IV.12})$$

où les opérateurs de spin σ_i^α agissant sur l'atome i sont définis par

$$\sigma_i^\alpha = \overset{1}{\downarrow} \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \overset{i}{\downarrow} \sigma_i^\alpha \otimes \dots \otimes \overset{N}{\downarrow} \mathbb{1}. \quad (\text{IV.13})$$

Le premier terme du hamiltonien (IV.15) provient d'un effet de bord : les atomes à chaque bout de la chaîne n'ont chacun qu'un seul voisin, cependant que les autres atomes en ont chacun deux. L'énergie d'interaction des atomes 1 et N est donc deux fois inférieure à celle des atomes du « cœur » de la chaîne, numérotés de 2 à $N - 1$.

Le hamiltonien d'interaction (IV.15) ne décrit que l'interaction dipôle-dipôle entre ces atomes. Or l'évolution de la chaîne de spin dépend également du hamiltonien libre \hat{H}_0 de chaque atome, qui induit une différence d'énergie $h\nu_0$ entre les niveaux $|nC\rangle = |\uparrow\rangle$ et $|n'C\rangle = |\downarrow\rangle$. Cette contribution s'écrit sous la forme d'un hamiltonien libre à N

atomes $\hat{H}_{0,N}/h = \frac{\nu_0}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i^z$. De plus, un champ microonde peut coupler les deux niveaux atomiques. avec une pulsation de Rabi Ω et un désaccord $\delta\nu$ par rapport à la transition atomique. En se plaçant dans le référentiel tournant à la fréquence du champ microonde et sous l'approximation séculaire, ce champ microonde agit sur chaque atome par le hamiltonien $\hat{H}_{\mu o}/h = \frac{\Omega}{2} \sigma_i^x + \frac{\delta\nu}{2} \sigma_i^z$.

Ces deux contributions s'ajoutent au hamiltonien d'interaction, et nous aboutissons à un hamiltonien total

$$\begin{aligned} \hat{H}/h &= \hat{H}_{0,N}/h + \hat{H}_{\mu o,N}/h + \hat{V}_{eff,N}/h \\ &= \frac{\nu_0}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i^z + \frac{\Omega}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i^x + \frac{\delta\nu - \nu_0}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i^z + \frac{\delta\zeta}{2} (\sigma_1^z + \sigma_N^z) + \delta\zeta \sum_{i=2}^{N-1} \sigma_i^z \\ &\quad + J_z \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + J \sum_{i=1}^{N-1} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y). \end{aligned} \quad (\text{IV.14})$$

La factorisation de cette expression amène finalement au hamiltonien « XXZ » d'une chaîne de spins couplés :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{XXZ,N} &= J \cdot \left[\sum_{i=1}^{N-1} \left(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \frac{J_z}{J} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Delta}{2J} \sum_{i=1}^N \sigma_i^z + \frac{\Omega}{2J} \sum_{i=1}^N \sigma_i^x \right] - \frac{\delta\zeta}{2} (\sigma_1^z + \sigma_N^z), \end{aligned} \quad (\text{IV.15})$$

où $\Delta = \delta\nu + \delta\zeta$. Sous cette forme, le couplage transverse entre les spins de la chaîne est réglé par le paramètre J et le couplage longitudinal par le paramètre J_z . Le paramètre d'anisotropie du couplage est donné directement par le rapport J_z/J . Le couplage microonde entre les niveaux atomiques est équivalent, pour des spins, à la présence d'un champ magnétique externe. La composante longitudinale de ce « champ » est représentée par le terme $\Delta/(2J)$ et sa composante transverse par le terme $\Omega/(2J)$. Le dernier terme du hamiltonien représente l'effet de bord de la chaîne évoqué plus haut, qui déplace l'énergie des atomes à chaque bout de la chaîne.

Les paramètres permettant l'exploration de différents régimes d'interaction et d'évolution de la chaîne se réduisent en fin de compte aux trois rapports J_z/J , Ω/J et Δ/J .

IV.3.3 Contrôle du hamiltonien et choix des niveaux 50C et 48C

Le niveau de contrôle du hamiltonien (IV.15) est limité par la gamme accessible au rapport J_z/J . Les rapports Ω/J et Δ/J sont en effet facilement contrôlables par les paramètres du champ microonde utilisé, alors que J_z/J dépend des niveaux atomiques choisis et des champs électrique et magnétique extérieurs.

Le rapport J_z/J dépend tout particulièrement de la différence de nombre quantique principal entre les deux niveaux atomiques choisis. La dépendance des termes d'échange et d'interaction directe en fonction des niveaux atomiques est discutée en détail dans la thèse de Thanh Long Nguyen [29]. Les calculs d'interaction montrent que pour une paire $|n_C, n'_C\rangle$, si $|n - n'| = 1$, le terme d'échange est très grand et varie en $1/r^3$. On se trouve alors dans une situation où J_z/J est toujours petit devant 1 et

dépend de la distance inter-atomique. Au contraire, si $|n - n'| > 2$ alors le terme d'échange devient vite négligeable et J_z/J est toujours grand devant 1. On se trouve dans une situation quasi classique où l'interaction entre les particules se limite à un déplacement d'énergie répulsif. Enfin, la situation $|n - n'| = 2$ permet d'obtenir des termes d'échange et d'interaction directe qui sont comparables et évoluent tous deux en $1/r^6$. Le rapport J_z/J ne dépend pas que de la différence $|n - n'|$, mais aussi du nombre quantique principal n lui-même. En effet, les termes d'interaction directe et d'échange entre les niveaux $|nC\rangle$ et $|(n-2)C\rangle$ ne varient pas de la même façon avec n . Le choix $n = 50, n' = 48$ permet de se situer dans un domaine propice à la flexibilité du simulateur, où J_z et J sont comparables, tout en laissant la possibilité de contrôler la valeur de J_z/J en faisant varier les champs électrique et magnétique extérieurs. La figure (IV.4) représente les valeurs accessibles de J_z/J pour les niveaux $|50C\rangle$ et $|48C\rangle$, en fonction du champ électrique imposé, pour différents champs magnétiques.

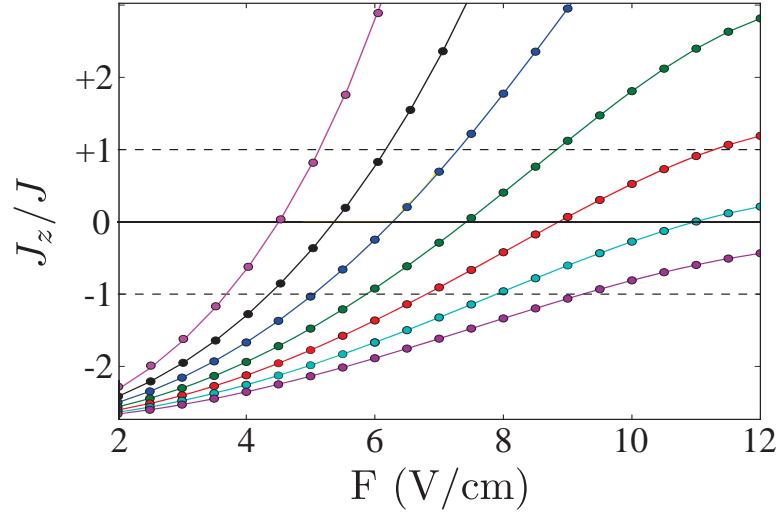


Figure IV.4 Variation de J_z/J pour une paire d'atomes dans les niveaux $|50C\rangle$ et $|48C\rangle$, en fonction du champ électrique F . Le champ électrique est dirigé selon Oz et les atomes sont séparés d'une distance $r = 5 \mu\text{m}$ selon l'axe Ox . Les points sont obtenus par diagonalisation du hamiltonien de paire complet pour différentes valeurs de champ magnétique $B_z = 9, 10, 11, 12, 13, 14$ et 15 G, de gauche à droite (points de couleur magenta, noir, bleu, vert, rouge, cyan et violet respectivement). Les lignes qui les relient sont des guides visuels.

Les niveaux atomiques choisis permettent de varier facilement le rapport J_z/J sur une large gamme allant de -3 à $+3$, en balayant le champ électrique F . Le contrôle de la source microonde couplant les niveaux atomiques 50C et 48C permet de varier facilement les termes Ω et Δ du hamiltonien (IV.15). Le contrôle du champ électrique comme de la source microonde sont rapides, de l'ordre de la nano-seconde. Le hamiltonien est ainsi sous contrôle expérimental intégral, à des échelles temporelles très inférieures au temps caractéristique de l'évolution du système, dominé par le terme d'échange dans l'interaction. Ce temps d'échange est donné par $\tau_{\text{éch}} = 1/(4J) = 14,7 \mu\text{s}$ si les atomes sont séparés de $r = 5 \mu\text{m}$ et $108 \mu\text{s}$ si les atomes sont séparés de $r = 7 \mu\text{m}$.

Grâce à ce très bon niveau de contrôle du hamiltonien, il est possible d'explorer à volonté le diagramme de phase présenté en figure (IV.5), extrait des résultats de [38] et détaillé dans [37]. Ce diagramme présente une grande richesse de phases et de transitions

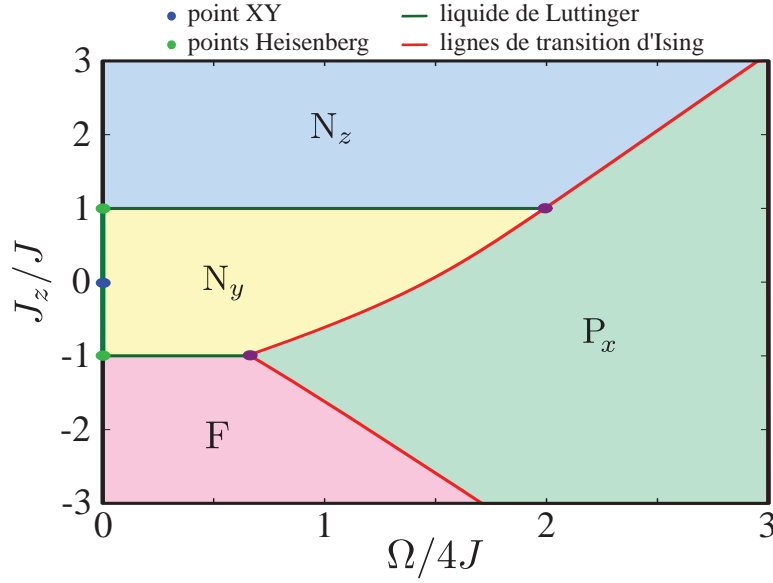


Figure IV.5 Schéma du diagramme de phase du hamiltonien (IV.15) pour $\Delta = 0$ et en négligeant le terme d'effet de bord $\delta\zeta$. Les différentes phases représentées sont : une phase P_x dans laquelle les spins suivent un ordre ferromagnétique selon la direction x , une phase F ferromagnétique selon la direction z , deux phases de Néel N_y et N_z selon les axes y et z respectivement. La phase P_x est séparée des autres par des lignes « de transition d'Ising », le long desquelles le système se réduit au modèle d'Ising. Le long des frontières entre les phases N_z et N_y et entre les phases N_y et F , le système se comporte comme un « liquide de Luttinger », généralisation en présence d'un champ magnétique des « points de Heisenberg ». Le point singulier XY marque la situation où le terme J_z est nul.

de phase. Une approche statique permettrait de calibrer le simulateur sur des phases connues, puis de simuler une évolution adiabatique passant par des transitions de phase quantiques. Le rapidité de contrôle du hamiltonien permettrait ensuite de simuler des trempes : des changements de paramètres brusques induisant des états hors-équilibre.

IV.4 Principes techniques du simulateur

Dans la seconde partie de ce chapitre, nous discutons les techniques nécessaires à la réalisation du simulateur quantique proposé : le piégeage laser des atomes de Rydberg circulaire, l'accroissement de leur durée de vie par inhibition de l'émission spontanée et la méthode d'« évaporation van der Waals » permettant la préparation déterministe d'une chaîne régulière d'atomes de Rydberg.

IV.4.1 Piégeage laser des Rydberg circulaires

Les atomes de Rydberg circulaires peuvent être piégés grâce au potentiel pondéromoteur créé, pour l'électron de valence, par un faisceau laser. Cet électron de valence, quasi libre, se comporte comme une particule chargée dans un champ électrique rapidement oscillant. Il subit ainsi un déplacement d'énergie positif, proportionnel à l'intensité

lumineuse I_L [39] :

$$\mathcal{E} = \frac{q^2}{2m_e\epsilon_0 c \omega_L^2} I_L = \frac{h\alpha}{m_e \omega_L^2} I_L, \quad (\text{IV.16})$$

où $\omega_L/2\pi$ est la fréquence du laser et $\alpha = q^2/(4\pi\hbar\epsilon_0 c)$ est la constante de structure fine. Le cœur positif de l'atome de Rydberg subit un déplacement d'énergie négatif $\mathcal{E}_{\text{cœur}} = -h\alpha I_L/(M\omega_L^2)$, où M est la masse du cœur atomique. Celle-ci étant très grande devant la masse m_e de l'électron, l'effet du laser sur le cœur atomique peut être négligé. En fin de compte, le potentiel pondéro-moteur (IV.16) agit sur l'atome de Rydberg de sorte que celui-ci recherche les basses intensités lumineuses.

La géométrie que nous cherchons à obtenir est une chaîne unidimensionnelle. Le confinement radial selon l'axe Ox est assuré par un faisceau « creux » de longueur d'onde $\lambda = 1064 \text{ nm}$, présentant un profil d'intensité de Laguerre-Gauss d'ordre $(0, 1)$. Ce profil d'intensité LG_0^1 est proportionnel à $(2\rho^2/w^4) \cdot e^{-2\rho^2/w^2}$, où ρ est la distance à l'axe optique et w le col du faisceau[§]. La figure (IV.6 a) représente le potentiel créé par ce faisceau dans le plan $x = 0$, pour une puissance laser de $0,5 \text{ W}$ focalisée sur un col $w = 7 \mu\text{m}$. Dans ces conditions, les atomes sont piégés transversalement à l'axe Ox avec des fréquences de piégeage $\omega_y = \omega_z = 2\pi \times 12 \text{ kHz}$.

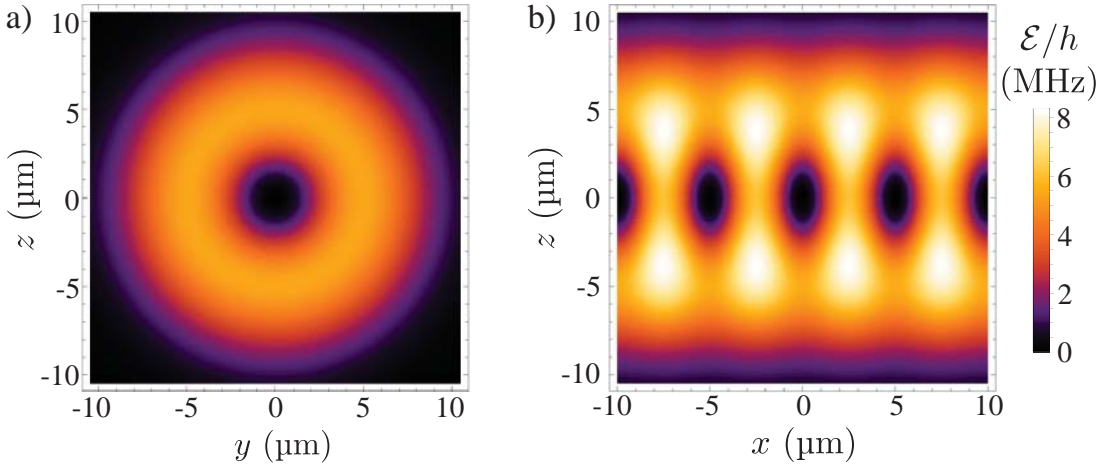


Figure IV.6 a) Coupe dans le plan yOz du potentiel pondéro-moteur créé par le faisceau Laguerre-Gauss se propageant selon l'axe Ox . b) Coupe dans le plan xOz du potentiel de piégeage pondéro-moteur créé par le faisceau Laguerre-Gauss et les deux faisceaux gaussiens en interférence. Le potentiel est exprimé en unités de fréquence. L'échelle de couleur est commune aux deux graphes.

Le confinement longitudinal doit permettre de fixer la distance séparant les atomes de la chaîne. Ce piégeage doit donc être périodique. En effet, l'interaction de van der Waals répulsive les atomes de Rydberg entraînerait un mouvement important des atomes le long de l'axe Ox en l'absence de piégeage périodique longitudinal. Afin de réaliser ce confinement, nous proposons d'utiliser un réseau lumineux d'un pas ajustable de l'ordre de $d = 5$ à $7 \mu\text{m}$. Ce réseau est créé par l'interférence à petit angle

[§]. La définition du col pour un profil de Laguerre-Gauss découle directement de celle pour un faisceau gaussien.

de deux faisceaux gaussiens. Ceux-ci sont décalés en fréquence de quelques dizaines de MHz par rapport au faisceau Laguerre-Gauss afin de ne pas interférer avec lui. Les deux faisceaux gaussiens se propagent dans le plan xOy avec un angle $\pm\theta$ par rapport à l'axe Oy . Pour obtenir un pas de réseau de $d = 5$ ou $7\ \mu\text{m}$, cet angle doit prendre respectivement les valeurs $\theta = 5,7^\circ$ ou $\theta = 4,1^\circ$. Ces deux faisceaux gaussiens sont allongés selon l'axe Ox afin que le réseau créé puisse recouvrir toute la longueur de la chaîne atomique. Ainsi, leur col selon x vaut $w_x = 200\ \mu\text{m}$ alors que leur col selon z vaut $w_z = 7\ \mu\text{m}$. Dans ces conditions, et avec une puissance totale par faisceau de $1,45\ \text{W}$ pour $d = 5\ \mu\text{m}$, ou de $2,8\ \text{W}$ pour $d = 7\ \mu\text{m}$, les atomes sont piégés dans la direction x avec une fréquence $\omega_x = 2\pi \times 24\ \text{kHz}$ et une profondeur de piège proche de $4\ \text{MHz}$, soit environ $200\ \mu\text{K}$.

Le potentiel créé dans le plan xOz par la superposition du faisceau Laguerre-Gauss et de ces deux faisceaux gaussiens est représenté en figure (IV.6 b), pour un pas de réseau de $5\ \mu\text{m}$. Nous disposons ainsi d'une chaîne de pièges profonds régulièrement espacés sur l'axe Ox .

IV.4.2 Préservation des états de Rydberg

Le piégeage laser présenté ci-dessus permet de fixer les positions des atomes de Rydberg circulaires au sein d'une chaîne unidimensionnelle. Si l'on en reste au calcul de I.2.2, chaque atome dans le niveau $50C$ a une durée de vie de $8,36\ \text{ms}$. Une chaîne de quarante atomes a ainsi une durée de vie de $8,36/40 = 0,21\ \text{ms}$. Avec des atomes séparés de $d = 5\ \mu\text{m}$ et donc un temps d'échange $\tau_{\text{éch}} = 14,7\ \mu\text{s}$, la chaîne d'atomes vit le temps d'une quinzaine d'échanges. C'est-à-dire qu'une excitation placée à un bout de la chaîne n'aurait pas le temps de se propager jusqu'au milieu de la chaîne. La solution la plus évidente pour rallonger la durée de vie d'un niveau de Rydberg consiste à refroidir l'environnement. Cependant, cela ne permettrait ici de l'améliorer que d'un facteur $8,36/28,65 \simeq 3,5$.

Comme nous l'avons vu en I.2.2, le seul processus limitant la durée de vie à température nulle d'un niveau de Rydberg circulaire nC est la désexcitation spontanée vers le niveau $(n-1)C$ par une transition σ^+ . Inhiber cette transition pourrait ainsi permettre d'augmenter significativement le temps de vie d'un niveau circulaire. Mais comment inhiber l'émission spontanée ? L'effet Purcell, observé en 1946 [40], consiste à augmenter le taux d'émission spontanée en plaçant le système émetteur dans une cavité résonante avec la transition considérée. Cet effet repose sur l'augmentation des fluctuations du vide électromagnétique dans le mode d'émission. Au contraire, il s'agit pour nous de réduire le plus possible ces fluctuations afin d'inhiber l'émission. Pour cela, il suffit que la cavité soit de dimensions plus petites que la longueur d'onde du rayonnement que l'on souhaite inhiber [41, 42]. Plus, précisément, dans le cas d'un condensateur formée de deux plans parallèles, la distance D entre ces deux plans doit être inférieure à la moitié de la longueur d'onde λ du rayonnement :

$$D < \lambda/2. \quad (\text{IV.17})$$

Les transitions $50C \rightarrow 49C$ et $48C \rightarrow 47C$ ont des fréquences respectives de $54,249\ \text{GHz}$ et $61,407\ \text{GHz}$, correspondant à des longueurs d'onde de $5,525\ \text{mm}$ et $4,882\ \text{mm}$. La condition (IV.17) nous impose donc de placer les atomes de Rydberg circulaires dans

un condensateur dont les deux plaques sont distantes de $D < 2,4$ mm. Dans le cas d'un condensateur infini idéal, cela suffirait à inhiber complètement le rayonnement à ces fréquences, et ainsi à rendre la durée de vie des niveaux circulaires infinie.

En pratique, il est nécessaire de tenir compte de la taille et de la conductivité finies du condensateur dans lequel nous placerons les atomes. Une simulation effectuée avec la suite logicielle CST Studio permet de calculer numériquement le taux d'émission spontanée résiduelle Γ des atomes à l'intérieur d'un condensateur formé de deux plaques d'or carrées de côté a , refroidies à une température d'1 K et distantes de D . La figure (IV.7) représente le rapport Γ/Γ_{48C} en fonction de a et D , où Γ_{48C} est le taux d'émission spontanée depuis le niveau circulaire 48C dans l'espace libre. Nous choisissons les

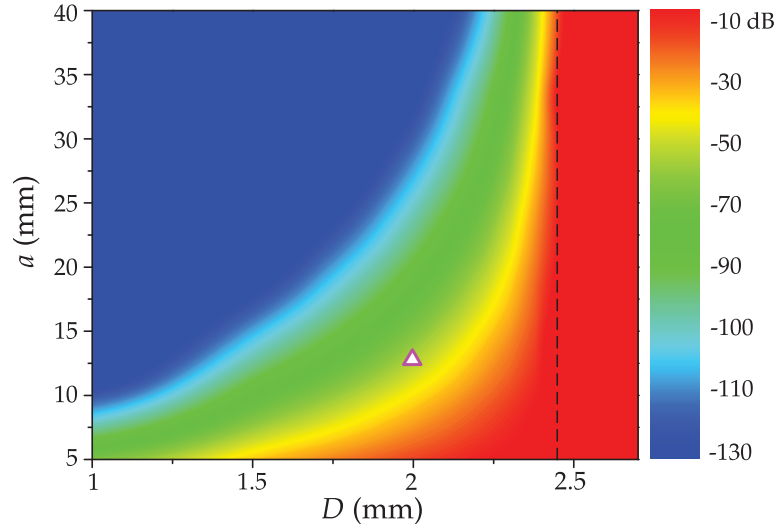


Figure IV.7 Rapport d'inhibition de l'émission spontanée Γ/Γ_{48C} en échelle log, en fonction de l'espacement D et de la taille a du condensateur. La ligne pointillée se situe à $D = \lambda/2$ et le triangle rouge représente les paramètres choisis $D = 2$ mm et $a = 13$ mm. L'émission spontanée y est inhibée de 50 dB.

paramètres $D = 2$ mm et $a = 13$ mm, où l'émission spontanée depuis le niveau 48C est inhibée d'un facteur 50 dB. Cela amène la durée de vie du niveau 48C à environ 2500 s. L'effet d'inhibition est encore meilleur pour le niveau 50C puisque l'émission spontanée depuis celui-ci se fait à une longueur d'onde plus grande.

Dès lors que l'on a presque supprimé le facteur principal limitant la durée de vie des niveaux de Rydberg, il devient nécessaire de prendre en compte des facteurs qui paraissent auparavant négligeables : la présence de photons thermiques à température finie, les collisions avec le gaz résiduel, la photo-ionisation due au laser de piégeage ainsi que la diffusion élastique des photons de ce même laser, la relaxation dipolaire, et le mélange des niveaux circulaires avec des niveaux elliptiques.

Le premier de ces facteurs est la température finie de l'environnement. Celle-ci induit des photons thermiques dans le domaine microonde qui stimulent la transition π depuis le niveau nC vers l'un des deux niveaux elliptiques $(n+1)E^\pm$ de la multiplicité du dessus. Ces transitions ne sont pas inhibées par le condensateur. Au contraire, elles sont favorisées par le grand nombre de modes électromagnétiques qui peuvent se propager entre les deux plaques et parallèlement à celles-ci. Le taux d'émission de ces transitions

est augmenté d'un facteur ≈ 2 . Il est donc important de refroidir l'environnement expérimental le mieux possible, et nous proposons une température de 0,4 K, accessible avec un cryostat à ^3He sans dilution. Un deuxième facteur de réduction de la durée de vie provient des collisions des atomes avec le gaz résiduel dans l'enceinte à vide.

En environnement cryogénique, des pressions de l'ordre de 10^{-14} mbar sont accessibles sans trop de difficulté [43, 44], limitant cet effet. La photo-ionisation des atomes de Rydberg due au laser de piégeage doit aussi être prise en compte. Heureusement, cet effet reste petit pour les niveaux circulaires, en raison du mauvais recouvrement entre leur fonction d'onde et les fonctions d'onde des électrons dans le continuum[¶]. Les photons du laser de piégeage peuvent également être élastiquement diffusés par les électrons de Rydberg. L'électron recevrait alors une importante quantité de mouvement causant une transition vers un niveau elliptique. La contribution de cet effet peut être calculée dans un modèle classique de diffusion Thomson. Les processus de relaxation dipolaire peuvent limiter la durée de vie : une paire d'atomes dans le niveau $|nC, nC\rangle$ est transférée dans le niveau de paire $|nE^-, nE^-\rangle$, et l'énergie libérée par cette transition est convertie en énergie cinétique. Les deux atomes elliptiques concernés seraient alors expulsés à grande vitesse. Cependant, l'élément de matrice de transition entre l'état initial piégé et l'état final, qui est une onde plane d'énergie élevée, est faible.

Enfin, en raison des interactions dipôle-dipôle, les niveaux de paire circulaire-circulaire sont perturbés et mélangés avec des niveaux de paires elliptiques, comme nous l'avons évoqué en IV.2.1. Or les niveaux elliptiques nE^\pm peuvent se désexciter spontanément par d'autres transitions que le niveau circulaire nC , en particulier vers le niveau $(n-1)C$ par une transition π et vers le niveau $(n-2)C$ par une transition σ^+ de plus petite longueur d'onde. Aucune de ces deux transitions, représentées en figure IV.8, n'étant inhibée par le condensateur, il est important de limiter au mieux le mélange des niveaux de paire, en imposant un champ électrique et un champ magnétique qui permettent de lever les dégénérescences entre niveaux de paire.

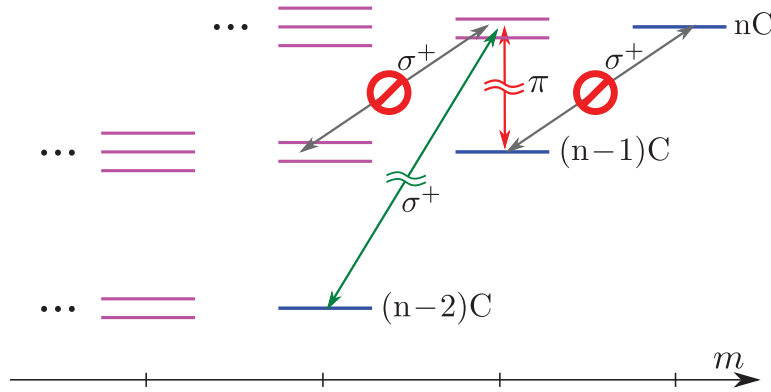


Figure IV.8 Transitions spontanées depuis le niveau circulaire nC et les niveaux elliptiques nE^\pm . Les transitions σ^+ de la multiplicité n vers la multiplicité $n-1$ sont inhibées par le condensateur. Les transitions π et σ^+ depuis les niveaux nE^\pm vers les niveaux $(n-1)C$ et $(n-2)C$ respectivement ne sont pas inhibées.

[¶]. Les fonctions d'onde électroniques dans le continuum oscillent rapidement, alors que la fonction d'onde de l'électron dans un niveau circulaire varie lentement avec la distance au noyau.

Les contributions de chacun de ces effets sont discutées dans la thèse de Thanh Long Nguyen [29] et dans [37]. Le tableau IV.1 en fait la synthèse. En tenant compte

Table IV.1 Contributions des différents effets limitant le temps de vie des atomes circulaires, pour une paire d'atomes dans le niveau 48C, séparés d'une distance $d = 5 \mu\text{m}$, sous un champ électrique $F = 6 \text{ V/cm}$ et un champ magnétique $B_z = 13 \text{ G}$. Les atomes sont placés dans un condensateur de taille $a = 13 \text{ mm}$ et d'écartement $D = 2 \text{ mm}$ et l'environnement est refroidi à $0,4 \text{ K}$ sous une pression de 10^{-14} mbar .

Phénomène	Temps de vie (s)
Émission spontanée résiduelle	2500
Émission stimulée par rayonnement du corps noir	630
Collisions avec le gaz résiduel à 10^{-14} mbar	400
Photo-ionisation	∞
Diffusion élastique des photons du piège	>180
Relaxation dipolaire	∞
Mélange des niveaux de paire	88
Temps de vie total	47

de tous ces effets, nous estimons la durée de vie d'un atome individuel à 47 s. La durée de vie d'une chaîne de 40 atomes est alors supérieure à la seconde. Cette borne inférieure est vérifiée dans l'ensemble du domaine de champs électrique et magnétique représenté en figure IV.4 permettant le contrôle du paramètre J_z/J . Cette durée de vie supérieure à une seconde représente de l'ordre de 80 000 temps d'échange $\tau_{\text{éch}}$ à $d = 5 \mu\text{m}$. Le simulateur quantique pourra ainsi évoluer sur des temps très longs et permettre d'observer des dynamiques lentes telles que des rétablissements d'équilibre ou des processus de thermalisation.

IV.4.3 Préparation déterministe d'une chaîne