

Un simulateur quantique avec des atomes de Rydberg

Les atomes de Rydberg sont des atomes neutres fortement excités avec grand nombre quantique principal n . Par rapport à un atome dans son état fondamental, ils ont des propriétés exagérées et présentent en particulier des interactions très fortes. Cela en fait des briques de bases excellentes pour bâtir des simulateurs quantiques. Ces exercices¹ permettent de se familiariser avec la manière dont les atomes de Rydberg interagissent entre eux et comment ils peuvent être exploités pour la simulation quantique.

Exercice 1 : Propriétés exagérées de l'atome de Rydberg

On considère dans cette partie le cas particulier d'un atome d'hydrogène, qu'on traitera en supposant que le noyau est fixe et est placé à l'origine. L'électron obéit lui à l'hamiltonien

$$\hat{H}_0 = \hat{E}_c + \hat{E}_p = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{\hat{r}}, \quad (1)$$

où \hat{E}_c correspond à l'énergie cinétique tandis que \hat{E}_p correspond à l'énergie potentielle. On notera $|n, \ell, m\rangle$ ses états propres, les fonctions d'ondes associées s'écrivant $\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$. Dans la suite, on utilisera les expressions

$$Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta. \quad (2)$$

et

$$R_{n,\ell}(r) = P_{n-\ell+1}(r) \times r^\ell \exp\left(-\frac{r}{na_1}\right) \quad (3)$$

où $P_{n-\ell+1}(r)$ est un polynôme de degré $n - \ell + 1$.

1.1. Rappeler la valeur de l'énergie de l'état $|n, \ell, m\rangle$. Exprimer le résultat en fonction de e^2 et du rayon de Bohr $a_1 = \hbar^2/(m_e e^2) \approx 0.053$ nm. On donne le Rydberg $R_y = m_e e^4/(2\hbar^2)$.

1.2. Soit \hat{A} un opérateur donné. Que vaut la grandeur $\langle n, \ell, m | [\hat{A}, \hat{H}_0] | n, \ell, m \rangle$?

1.3. On pose $\hat{A} = \hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z$. Calculer les commutateurs $[\hat{A}, \hat{p}^2] = 2i\hbar\hat{p}^2$ et $[\hat{A}, 1/\hat{r}] = i\hbar/\hat{r}$.

1.4. En déduire $[\hat{A}, \hat{H}_0]$ puis établir une relation entre les valeurs moyennes de \hat{E}_c et \hat{E}_p prises dans l'état $|n, \ell, m\rangle$.

1.5. En déduire que

$$\langle n, \ell, m | \frac{1}{\hat{r}} | n, \ell, m \rangle = \frac{1}{n^2 a_1}. \quad (4)$$

1.6. Donner un ordre de grandeur de la valeur de $\langle r \rangle$ pour un état de Rydberg correspondant à $n = 60$.

1.7. On considère l'observable dipôle électrique $\hat{d} = q\hat{r}$, où $q = -1.6 \times 10^{-19}$ C. Donner sa valeur moyenne lorsque le système est placé dans un état $|n, \ell, m\rangle$.

1.8. Déterminer pour quelle valeur de ℓ et m le dipôle de transition $\langle n, \ell, m | \hat{d}_z | n, 0, 0 \rangle = q \langle n, \ell, m | \hat{z} | n, 0, 0 \rangle$ est non nul. On exprimera cet élément de matrice en fonction de la grandeur

$$a_{n,\ell} = \int_0^{+\infty} R_{n,\ell}(r) R_{n,0}(r) r^3 dr. \quad (5)$$

On pourra utiliser la relation d'orthonormalité

$$\langle \ell, m | \ell', m' \rangle = \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_{\ell,m}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell',m'}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'}. \quad (6)$$

1.9. Procéder de manière similaire pour les éléments de matrice de \hat{x} et \hat{y} .

1.10. En déduire un ordre de grandeur pour ces éléments de matrice.

¹Merci à Manuel Joffre pour le premier exercice.

Exercice 2 : Blocage de Rydberg et simulation quantique

La conséquence naturelle des grands dipôles de transition des atomes de Rydberg est qu'ils interagissent très fort entre eux. Considérons deux atomes A et B séparés par une distance R beaucoup plus grande que leur taille. Les deux atomes étant neutres, ils interagissent principalement via un couplage dipôle-dipôle, décrit par l'hamiltonien

$$\hat{V} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 R^3} \left(\hat{\vec{d}}_A \cdot \hat{\vec{d}}_B - 3(\hat{\vec{d}}_A \cdot \vec{u})(\hat{\vec{d}}_B \cdot \vec{u}) \right) \quad (7)$$

où $R = ||\vec{R}_B - \vec{R}_A||$ est la distance séparant les deux atomes et \vec{u} est un vecteur unitaire orienté le long du vecteur $\vec{R}_B - \vec{R}_A$. L'opérateur $\hat{\vec{d}}_A$ (resp. $\hat{\vec{d}}_B$) correspond à l'observable dipôle électrique de l'atome A (resp. B). L'Hamiltonien agit dans la base $\{|n, l, m\rangle \otimes |n', l', m'\rangle\}$.

2.1. Supposons que les deux atomes soient dans l'état $|ns\rangle$ (on omettra les indices m dans la suite). En général, l'hamiltonien \hat{V} ne couple l'état $|ns, ns\rangle$ essentiellement qu'à l'état $|np, (n-1)p\rangle$. Proposer un Hamiltonien effectif simple décrivant le système. On notera $\delta = E_{|np\rangle} + E_{|(n-1)p\rangle} - 2E_{|ns\rangle}$ et $C_3/R^3 = \langle ns, ns | \hat{V} | np, (n-1)p \rangle$.

2.2. Donner les énergies propres de cet Hamiltonien effectif.

2.3. On se place dans le cas $C_3/R^3 \ll \delta$. Que deviennent les états propres et énergies propres ? Montrer que l'on a $E_{|ns, ns\rangle} - 2E_{|ns\rangle} \propto n^{11}$.

2.4. Supposons que les atomes A et B soient tous deux dans leur fondamental $|g\rangle$ ($|5s\rangle$ pour le Rb). Que se passe-t-il si l'on irradie l'atome A avec un laser² à la pulsation $\omega = (E_{|ns\rangle} - E_{|g\rangle})/\hbar + \Delta$ où Δ est le désaccord du laser ?

2.5. Ecrire l'Hamiltonien effectif de l'atome A dans le référentiel tournant du laser pour une pulsation de Rabi Ω . On pourra utiliser les matrices de Pauli $\sigma_{x,y,z}$.

2.6. Que se passe-t-il si l'on irradie les deux atomes A et B en même temps ? A quelle séparation R observe-t-on le phénomène de blocage de Rydberg ?

2.7. Ecrire un Hamiltonien effectif pour les atomes A et B dans le référentiel tournant du laser.

2.8. Dans le but d'effectuer une simulation quantique, on piège un ensemble d'atomes dans une série de pinces optiques formant une chaîne à une dimension. L'ensemble est irradié avec un laser comme précédemment. On encode des états de pseudo-spin $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ respectivement dans $|g\rangle$ et $|ns\rangle$. On suppose que les atomes n'interagissent qu'entre plus proches voisins. Ecrire l'Hamiltonien de cet ensemble dans le référentiel tournant du laser.

2.9. Pourquoi dit-on que cet ensemble d'atomes simule le modèle d'Ising quantique³ ?

²Dans les faits, on utilise en fait 2 lasers pour respecter les règles de transition vues dans l'exercice 1.

³Pour plus de détails : Browaeys, A., Lahaye, T. *Many-body physics with individually controlled Rydberg atoms*. *Nat. Phys.* 16, 132–142 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41567-019-0733-z> ou <https://arxiv.org/abs/2002.07413>