

Chaire de Physique Quantique-Cours 2013-2014

**Contrôle de particules quantiques  
isolées (2):  
Atomes de Rydberg froids en  
interaction**

*Notes de cours (documents Pdf) et vidéos des leçons sur le  
site internet du Collège de France*

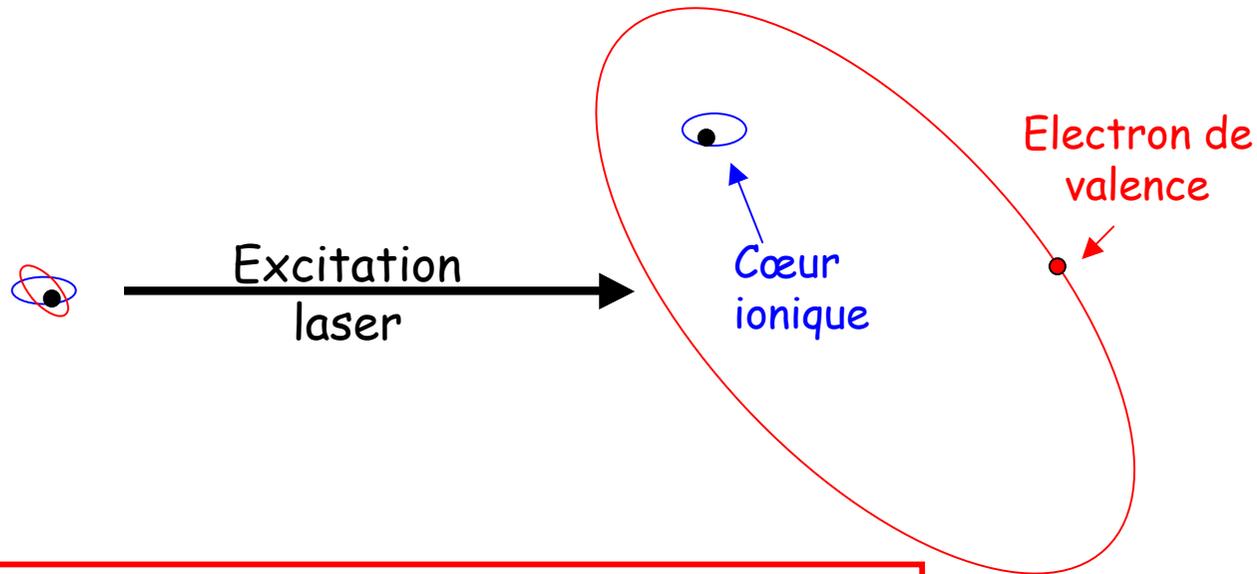
*Six leçons suivies d'un séminaire du 25 Mars au 13 Mai 2014*

# Sujet du cours de l'année

Le cours de l'année 2012-2013 a porté sur l'Electrodynamique quantique en cavité et a décrit des expériences de mesure et de manipulation à l'aide d'atomes de Rydberg de photons piégés dans une cavité. Dans ces études, les atomes très excités servent de sondes et d'outils pour étudier le champ. Le couplage des atomes à la cavité est exploité pour manipuler le champ qu'elle contient, mais aussi pour intriquer les atomes la traversant successivement. Les ordres de grandeur inhabituels des atomes de Rydberg (grande taille et grands dipôles électriques induits) jouent un rôle essentiel dans ces expériences.

Les atomes de Rydberg sont, depuis une dizaine d'années, étudiés dans un autre contexte pour réaliser des expériences de physique fondamentale sur l'interaction atome - atome ou atome - photons. Il ne s'agit plus de coupler ces atomes à des cavités, mais d'exploiter directement le très fort couplage de type van der Waals entre atomes de Rydberg pour démontrer des opérations élémentaires d'information quantique (réalisation de portes logiques couplant des atomes entre eux) et pour étudier des effets quantiques dus aux interactions collectives entre atomes géants "figés" dans leur mouvement. Ces expériences utilisent des méthodes laser de contrôle de la position et de la vitesse atomique (refroidissement et piégeage optique des atomes). Le cours de cette année se propose de décrire ces expériences sur les "atomes de Rydberg froids" qui constituent un chapitre nouveau et très prometteur dans la physique du contrôle des particules quantiques isolées.

# Des atomes très excités aux propriétés "exagérées"



Johannes Rydberg  
(1854-1919)

## Formule de Rydberg:

$$E = - \frac{R_y}{(n - \delta)^2}$$

← Constante de Rydberg

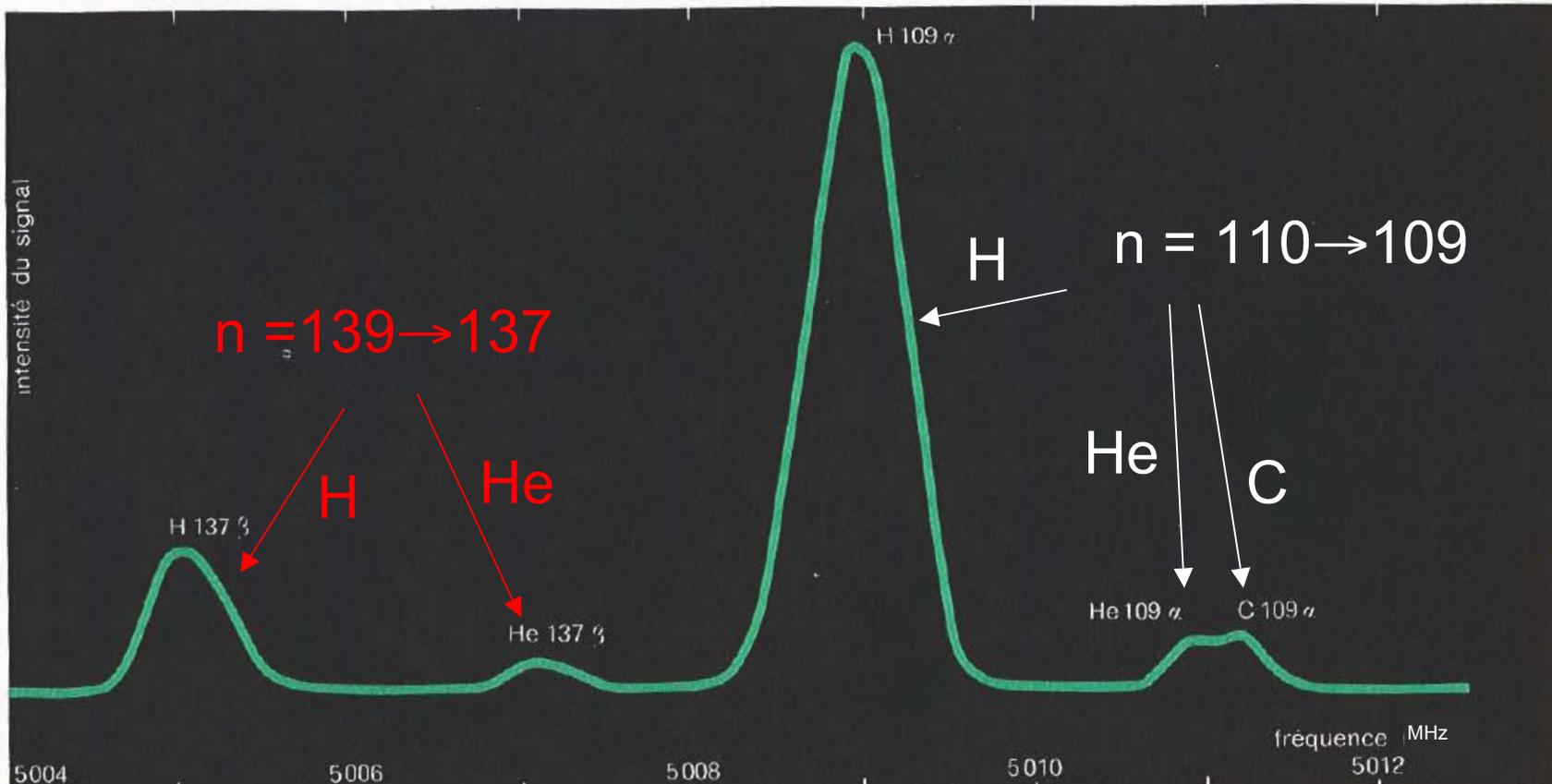
← Défaut quantique (effet perturbatif du cœur)

Nombre quantique principal:  $n = \dots 10 \dots 20 \dots 50 \dots 100 \dots$

Atome ressemblant à l'hydrogène, de très grande taille, de très longue durée de vie, très sensible aux champs extérieurs, au rayonnement micro-onde et aux interactions entre atomes

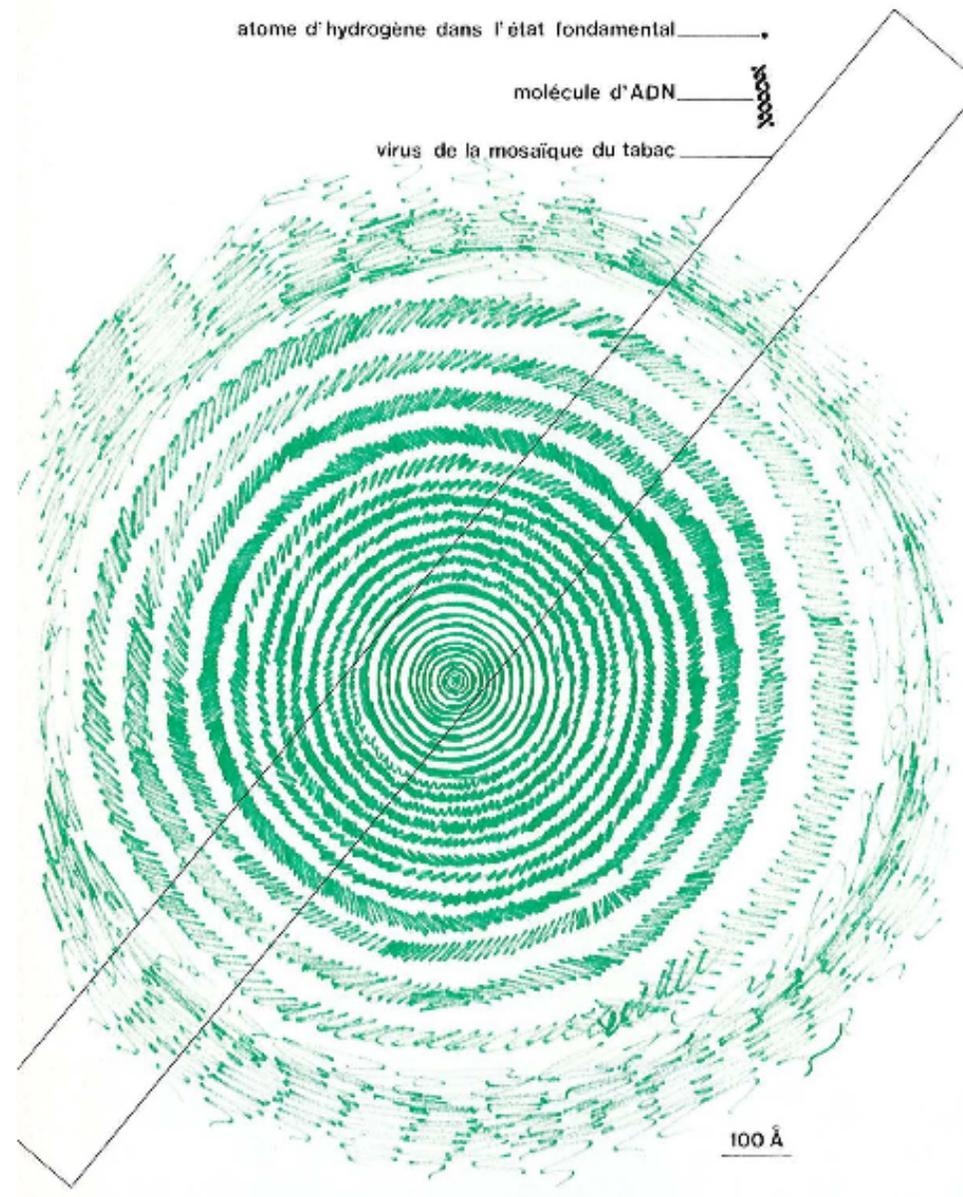
# Spectre millimétrique d'atomes de Rydberg détectés en radioastronomie

(Dupree et Goldberg, Annual Rev. Astronomy and Astrophysics, 8, 232 (1976))



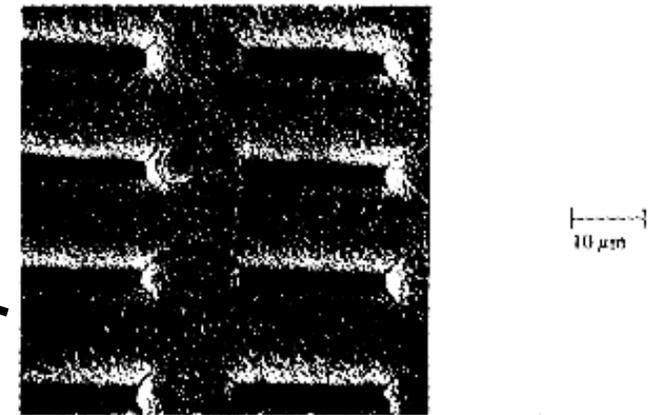
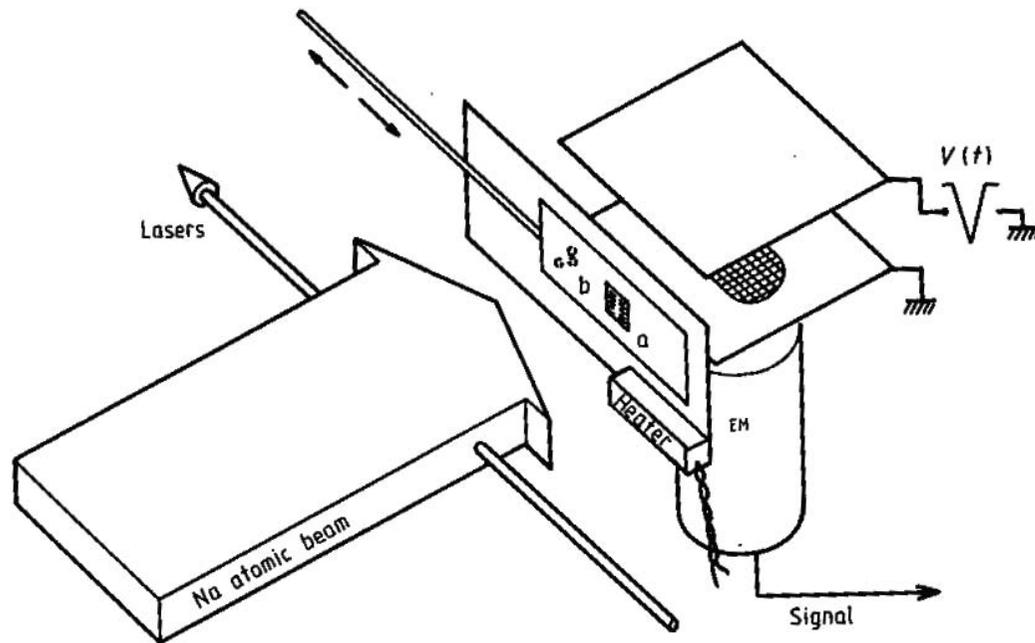
# L'état 30 S de l'Hydrogène

(représentation qualitative de la distribution électronique)



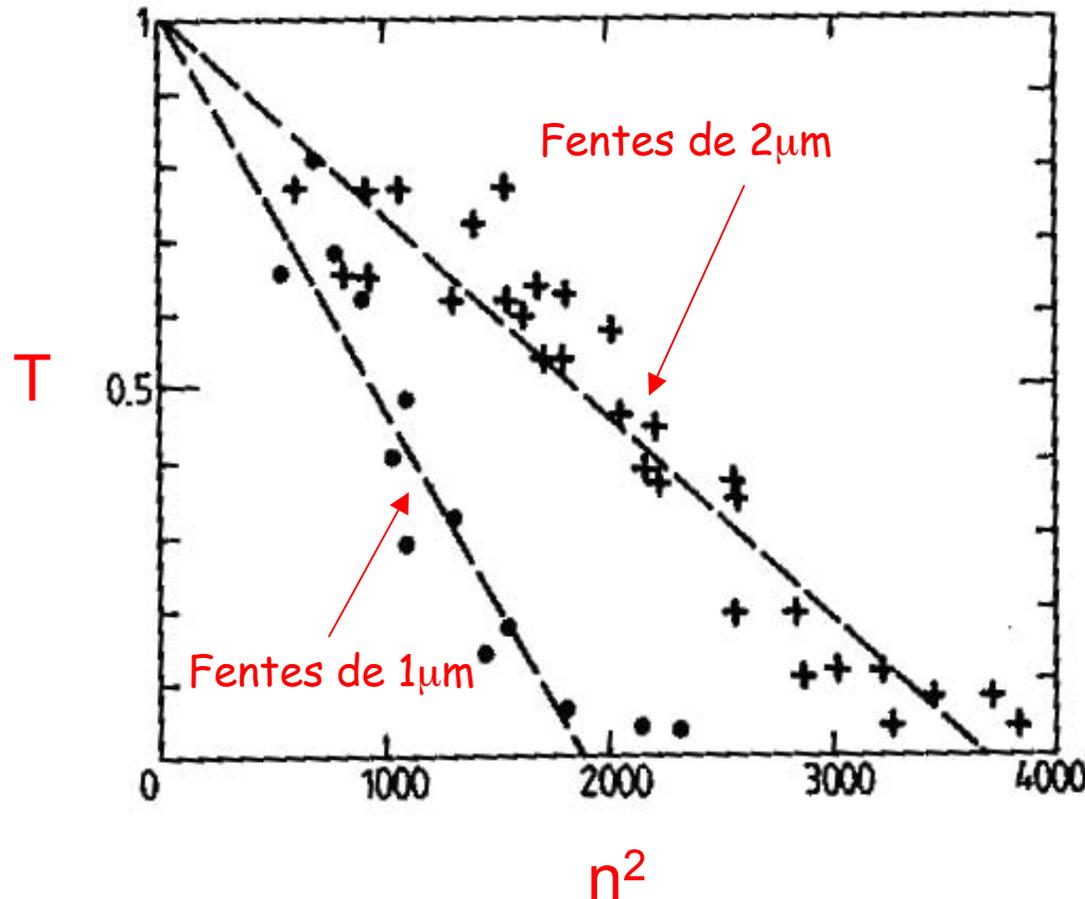
# Mesure de la taille des atomes de Rydberg à l'aide d'une "passoire"

Atomes excités dans l'état  $nD$  du Sodium ( $n$  variant de 23 à 65) et détectés après traversée du réseau de fentes



Fentes de 2  $\mu\text{m}$  de large et de 3  $\mu\text{m}$  d'épaisseur

Transmission  $T$  des fentes en fonction de  $n^2$  pour un réseau normal au jet atomique et pour un réseau incliné de  $20^\circ$  (correspondant à une largeur effective des fentes divisée par 2). Les droites correspondent à un fit semi-théorique décrivant la destruction des atomes sous l'effet de l'ionisation de l'électron de Rydberg au voisinage du métal (diamètre des atomes à la coupure environ 10 fois plus petit que la largeur des fentes).



C.Fabre,  
M.Gross,  
J-M.Raimond &  
S.Haroche  
Journal of  
Physics B, **16**,  
L671 (1983)

# Une brève histoire de la physique des atomes de Rydberg

- o **1890**: La formule empirique de Rydberg donne les fréquences des séries de transition convergeant vers la limite d'ionisation des atomes.
- o **1913**: Le modèle de l'atome de Bohr, basé sur le principe de correspondance, déduit par des arguments classiques les propriétés des états atomiques à grands nombres quantiques.
- o **1934**: Premières expériences, interprétées par Fermi, sur les déplacements collisionnels des états très excités d'atomes alcalins en présence de gaz rares sous forte pression.
- o **1965**: Observation de raies d'émission radiofréquence d'atomes de Rydberg formés par capture d'électrons par des ions dans le milieu interstellaire.
- o **1975**: Premières études spectroscopiques des états de Rydberg des atomes alcalins à l'aide de lasers accordables, incluant les mesures de défauts quantiques, d'effet Stark et Zeeman. Mise au point des méthodes de préparation et de détection de ces états (Kleppner, Gallagher, groupe de l'ENS...)
- o **1980**: Premières études sur le couplage des atomes de Rydberg aux micro-ondes et développement de l'électrodynamique en cavité (Walther, Kleppner, groupe ENS)

# Histoire de la physique des atomes de Rydberg (suite)

- o **1990's-2000's**: Utilisation des atomes de Rydberg circulaires en électrodynamique quantique en cavité et en information quantique (voir cours des années antérieures).
- o **2000**: Propositions par P.Zoller, M.Lukin et al d'utiliser les interactions entre atomes de Rydberg pour faire de l'information quantique et étudier de nouveaux états de la matière en physique mésoscopique.
- o **2005-2014**: Une renaissance de la physique des atomes de Rydberg avec de nombreuses expériences sur des atomes froids excités dans des états de Rydberg en information quantique, en optique quantique et en physique mésoscopique.

Deux références donnant des informations "historiques":

"Highly Excited Atoms", D. Kleppner, M.G. Littman and M.L. Zimmerman, Scientific American, 244, 130 (1981)

"Rydberg atoms", T. Gallagher, Cambridge University Press (1994).

Une revue sur les développements récents en information quantique:

"Quantum information with Rydberg atoms", M.Saffman, T.G.Walker and K.Molmer, Rev.Mod.Phys. 82, 2313, 2010.

# Plan du Cours

**Première leçon (25 Mars 2014):** Introduction: rappels sur l'information quantique et présentation qualitative des interactions entre atomes de Rydberg comme moyen pour intriquer des atomes et réaliser des portes quantiques. Rappels sur la structure des atomes de Rydberg dans une approche semi-classique et quantique.

**Deuxième leçon (1<sup>er</sup> Avril 2014):** Atomes de Rydberg dans des champs extérieurs statiques ou rayonnants. Durées de vie. Lois d'échelles et propriétés "exagérées" de ces états. Description d'expériences sur ces états.

**Troisième leçon (8 Avril 2014):** Interactions van der Waals entre atomes de Rydberg (cas résonant et non-résonant). Description des premières expériences étudiant ces interactions (1980-1990): collisions résonnantes entre atomes de Rydberg, spectroscopie d'un gaz dense de Rydberg, atomes de Rydberg couplés à leur image dans un miroir.

# Plan du cours (suite)

**Quatrième leçon (29 Avril 2014):** "Blocage" Rydberg dans un système de deux atomes. Réalisation expérimentale de portes quantiques, mesure quantitative de l'interaction de van der Waals entre deux atomes de Rydberg en fonction de leur taille et de leur distance.

**Cinquième leçon (6 Mai 2014):** Ensembles mésoscopiques d'atomes de Rydberg froids: excitations collectives, préparation et étude de cristaux quantiques d'atomes de Rydberg, applications possibles à l'information quantique.

**Sixième leçon (13 Mai 2014):** Optique non-linéaire exploitant les effets de blocage Rydberg par transparence induite électromagnétiquement: réalisation d'expériences d'interaction photon-photon et applications possibles à l'information quantique.

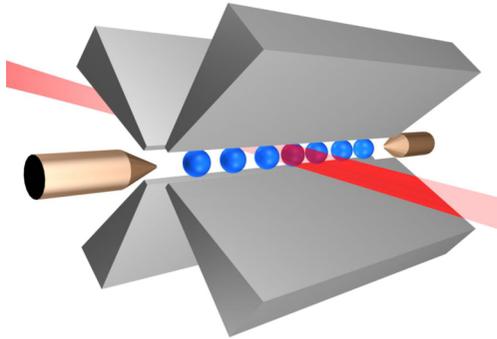
# Les séminaires de l'année 2013-2014

- 25 Mars 2014: **Per Delsing**, Chalmers University, Göteborg, Suède:  
"Propagating photons and phonons interacting with artificial atoms".
- 1<sup>er</sup> Avril 2014: **Tilman Pfau**, Université de Stuttgart, Allemagne:  
"How electrons catch ground state atoms -from two to few to many-body physics".
- 8 Avril 2014: **Matthias Weidemuller**, Université de Heidelberg, Allemagne:  
"Interaction enhanced imaging and energy transport in ultracold Rydberg gases".
- 29 Avril 2014: **Frederick Merkt**, Ecole Polytechnique de Zurich, ETH (Suisse):  
"Manipulating Rydberg atoms and molecules in the gas phase and near surfaces"
- 6 Mai 2014: **Klaus Mølmer**, Université de Aarhus, Danemark: "Exciting physics with excited atoms"
- 13 Mai 2014: **Sébastien Gleyzes**, LKB, ENS et Collège de France:  
"Démonstration de l'effet Zénon dynamique dans un atome de Rydberg"

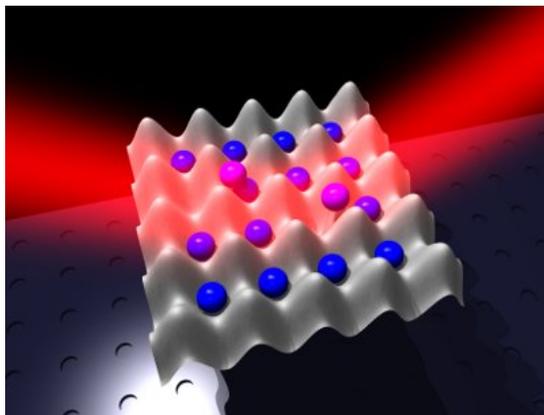
I-A

Rappels sur l'intrication entre atomes et  
principe de l'information quantique basée sur  
l'interaction Rydberg-Rydberg

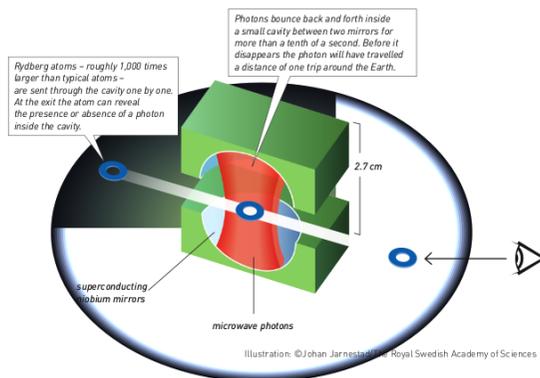
# Différentes façons de contrôler l'interaction entre atomes à 2 niveaux (qubits)



Ions piégés:  
interaction Coulombienne +  
excitation laser sélective



Atomes neutres froids:  
piégeage optique+collision  
contrôlée



Atomes de Rydberg circulaires  
couplés à une cavité: intrication  
par échange de photons

# Couplage de deux qubits pour réaliser une porte quantique et de l'intrication

## Porte de phase: Control- $\sigma_z$

Qubit contrôle

Qubit cible

Opération  $\sigma_z$  sur cible ssi contrôle dans 1

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$ 0,0\rangle$	$ 0,1\rangle$	$ 1,0\rangle$	$ 1,1\rangle$
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$			

Crée de l'intrication

$$(|0\rangle+|1\rangle)(|0\rangle+|1\rangle) \rightarrow (|0\rangle)(|0\rangle+|1\rangle) + (|1\rangle)(|0\rangle-|1\rangle)$$

Conduit à une porte CNOT (control- $\sigma_x$ ) par opérations H sur qubit cible:

H: Hadamard

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = H\sigma_z H$$

avec  $H = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_z + \sigma_x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$

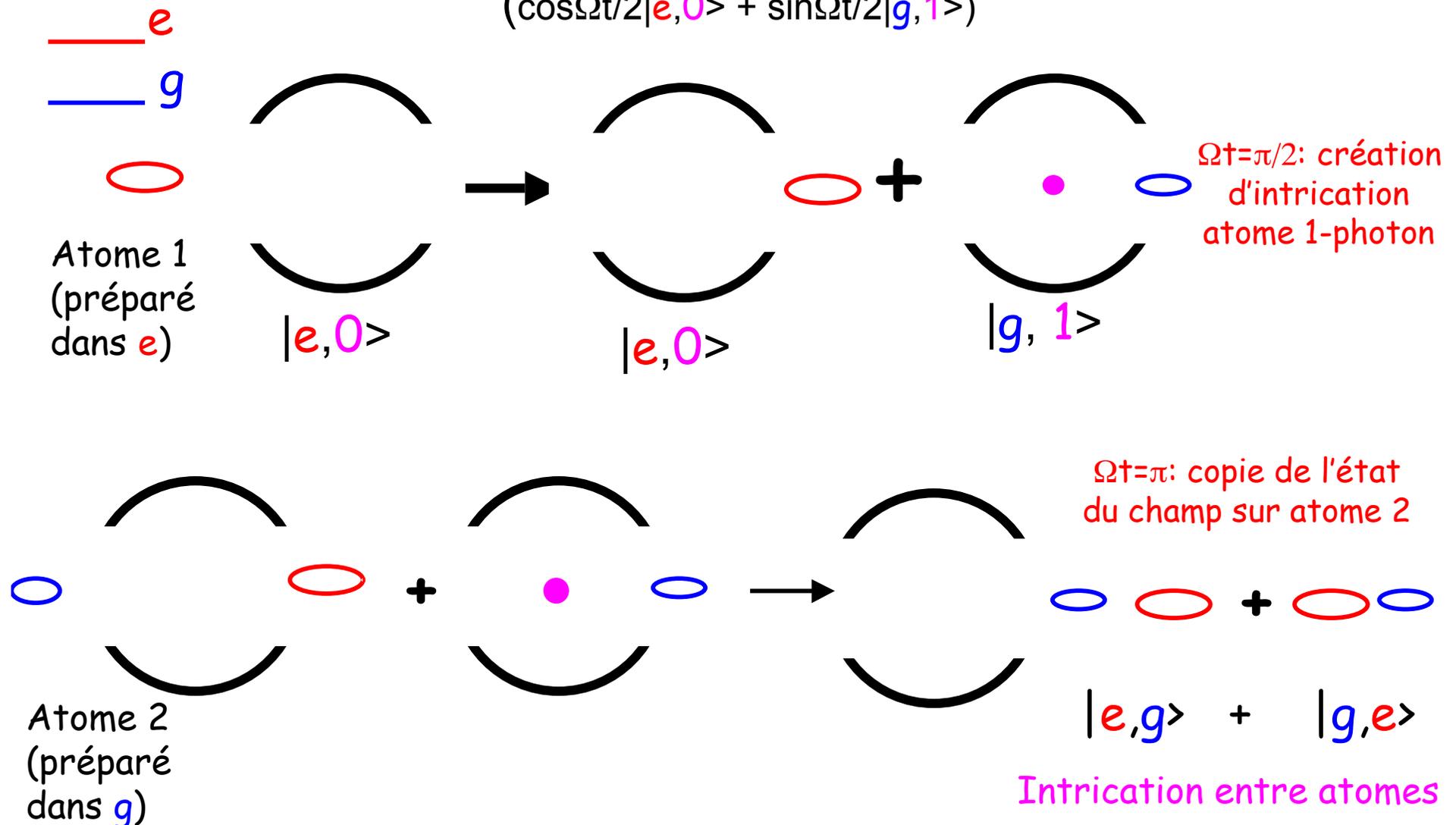
Table de la CNOT

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

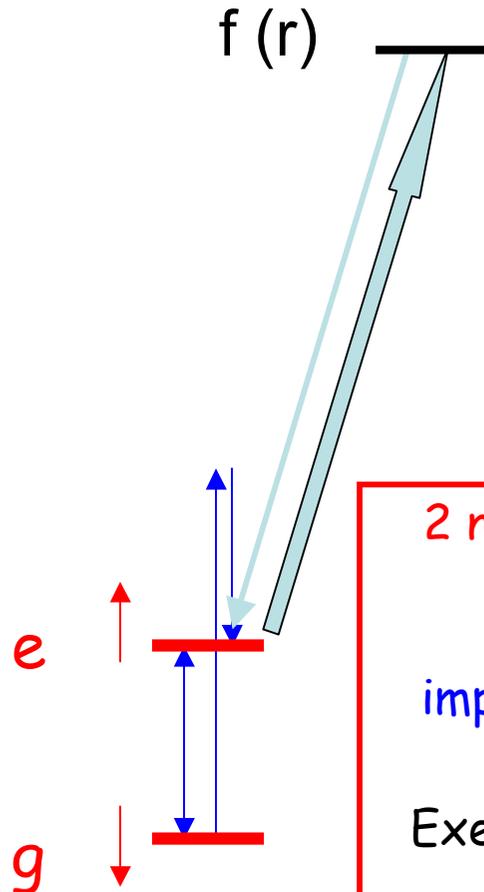
# CQED avec des atomes de Rydberg: comment intriquer deux atomes (rappel)

Oscillation de Rabi résonante pour 2 atomes traversant successivement la cavité:

$$(\cos\Omega t/2|e,0\rangle + \sin\Omega t/2|g,1\rangle)$$



# Un atome "générique" pour réaliser des opérations d'information quantique: 2 états fondamentaux et 1 état excité



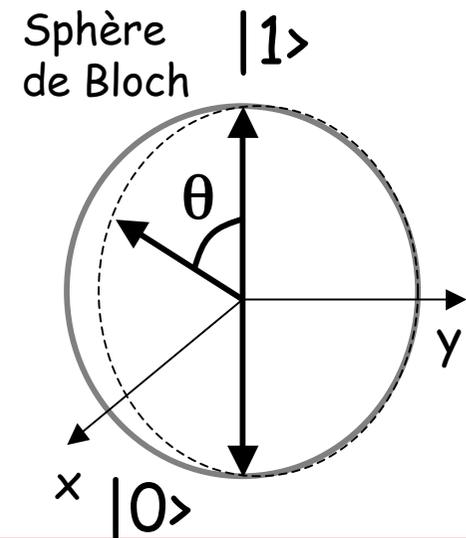
Un niveau électronique  $f$  excité relié à l'un des états du qubit par une transition optique utilisée pour initialiser le qubit (pompage optique), pour le refroidir (échange d'impulsion avec les photons), pour détecter le qubit (par fluorescence) ou encore pour le préparer transitoirement dans un état de Rydberg très excité ( $f$  est alors un état de Rydberg  $r$ ).

2 niveaux fondamentaux  $|0\rangle$  et  $|1\rangle$  codant un qubit (équivalent à un spin).  
Rotations du qubit assurées par impulsions rf ou par transitions Raman cohérentes (lasers)

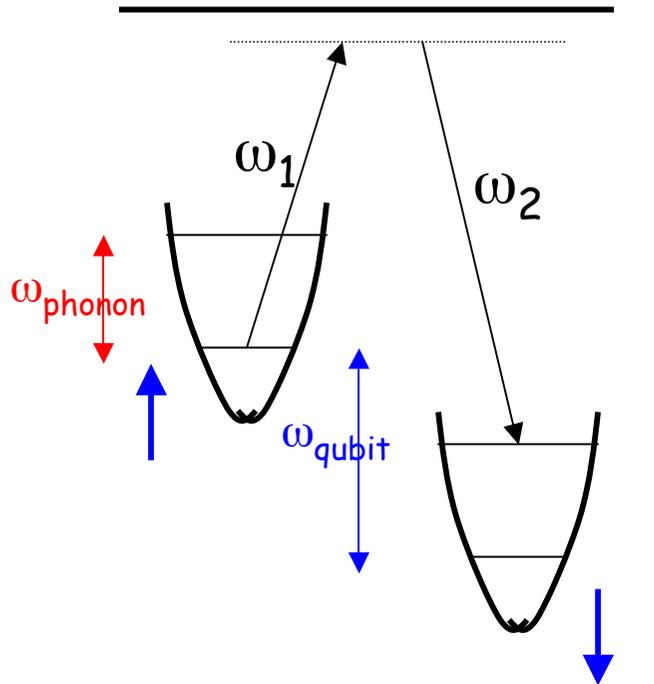
Exemple: rotation de  $\theta$  autour de  $Oy$ :

$$|1\rangle \rightarrow \cos\frac{\theta}{2}|1\rangle - \sin\frac{\theta}{2}|0\rangle$$

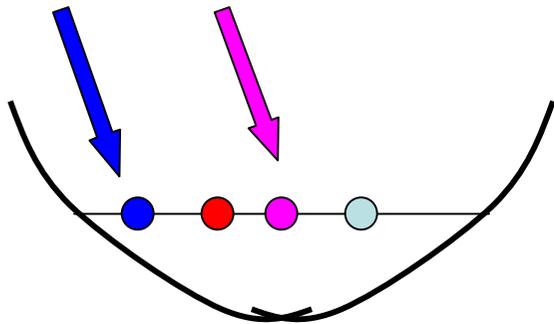
$$\text{si } \theta = 2\pi : |1\rangle \rightarrow \cos\pi|1\rangle = -|1\rangle$$



# Caractéristiques du couplage entre ions:



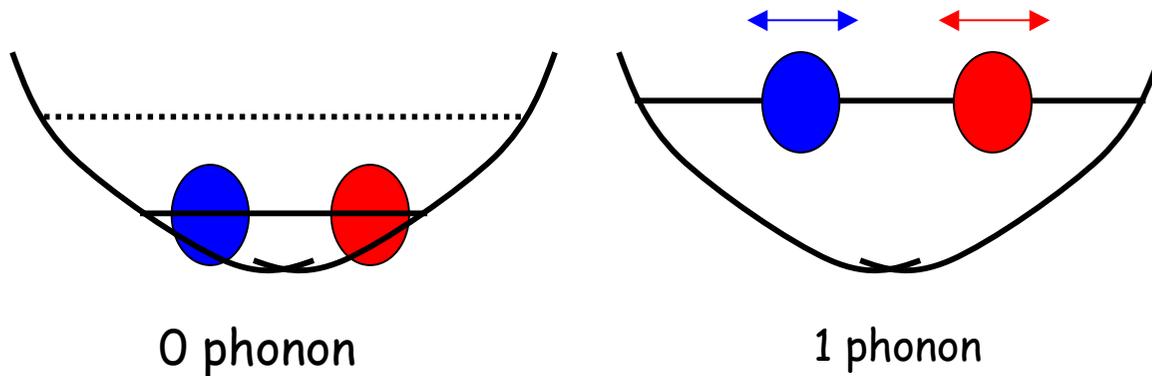
$$\omega_2 - \omega_1 = \omega_{qubit} - \omega_{phonon}$$



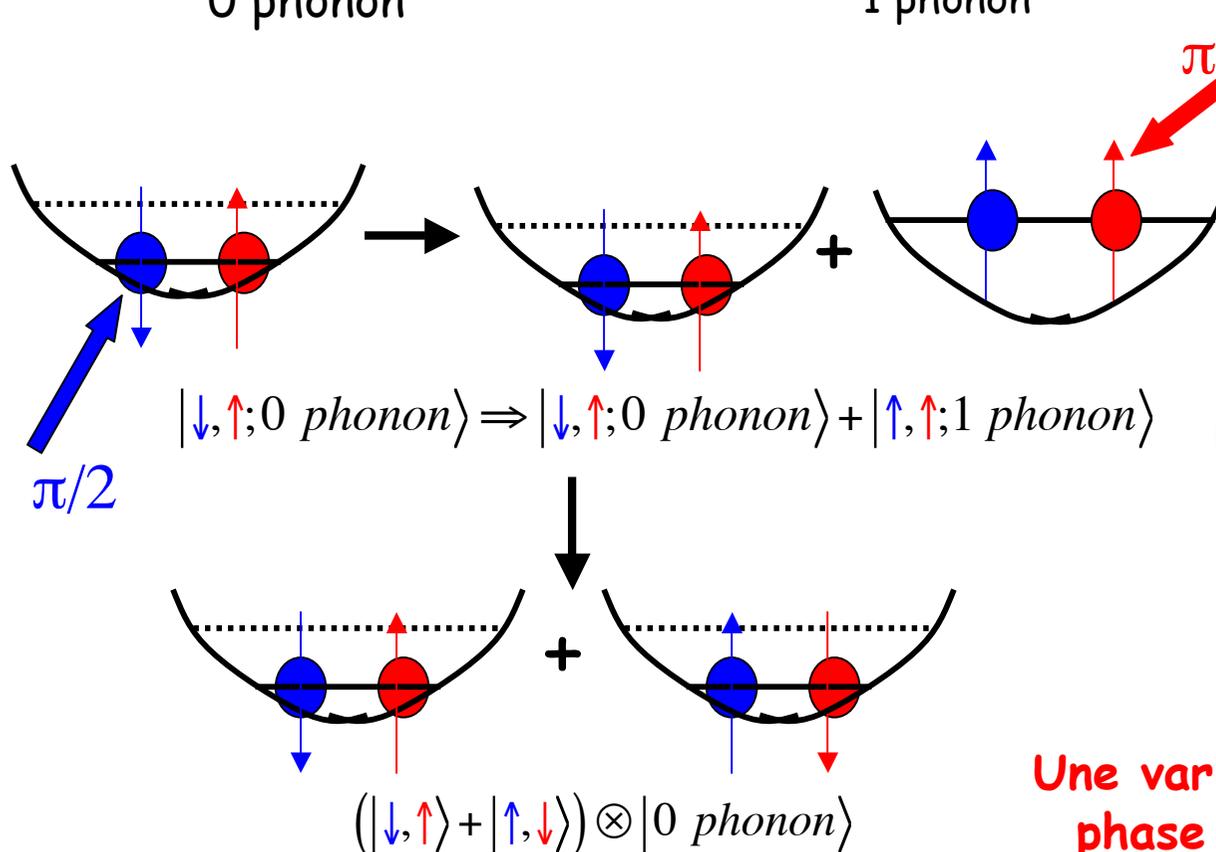
Les états du qubit sont couplés par création transitoire de phonons qui stockent de l'information quantique ("quantum bus"). Les phonons sont créés par un (ou des) laser(s) faisant basculer le qubit en changeant le nombre de phonons (excitation résonnante sur bande latérale "rouge" ou "bleue"). La fréquence de Rabi, pour être sélective, doit être inférieure à la fréquence de vibration des ions, typiquement de l'ordre du MHz. Les temps d'interaction sont de l'ordre de la microseconde.

Dans le cas d'une chaîne d'ions, le couplage peut s'effectuer entre deux ions quelconques sélectivement excités par les lasers: portée de l'interaction de plusieurs microns (interaction de Coulomb en  $1/r$ ). Portes quantiques réalisées à l'aide de variantes de ce type d'interaction...

# Intrication d'ions: couplage de 2 qubits initialement dans l'état $\downarrow\uparrow$



Les ions qui se repoussent (force de Coulomb) vibrent à distance constante (mode du centre de masse CM). La vibration contient 0 ou 1 phonon

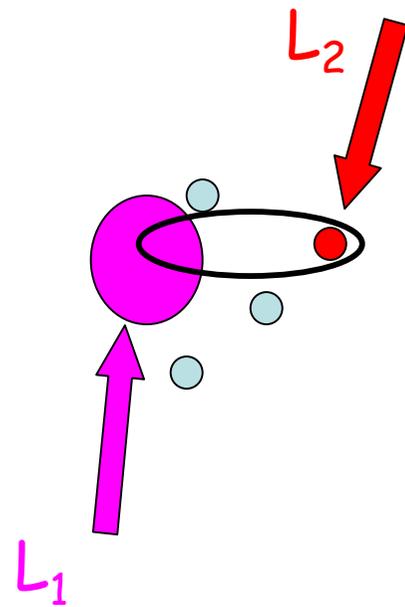


Vibration excitée par laser 1 poussant le qubit 1 en basculant son état. Si l'impulsion est  $\pi/2$ , le qubit 1 est intriqué avec la vibration collective. L'état du qubit 2 est non affecté.

Un laser 2 agissant sur le qubit 2 (impulsion  $\pi$ ) annihile le phonon en basculant le qubit 2 (transformation inverse de celle effectuée sur qubit 1): les deux qubits finissent intriqués et le phonon a disparu.

**Une variante réalise une porte de phase ou CNOT entre les ions**

# Caractéristiques générales des interactions Rydberg-Rydberg:

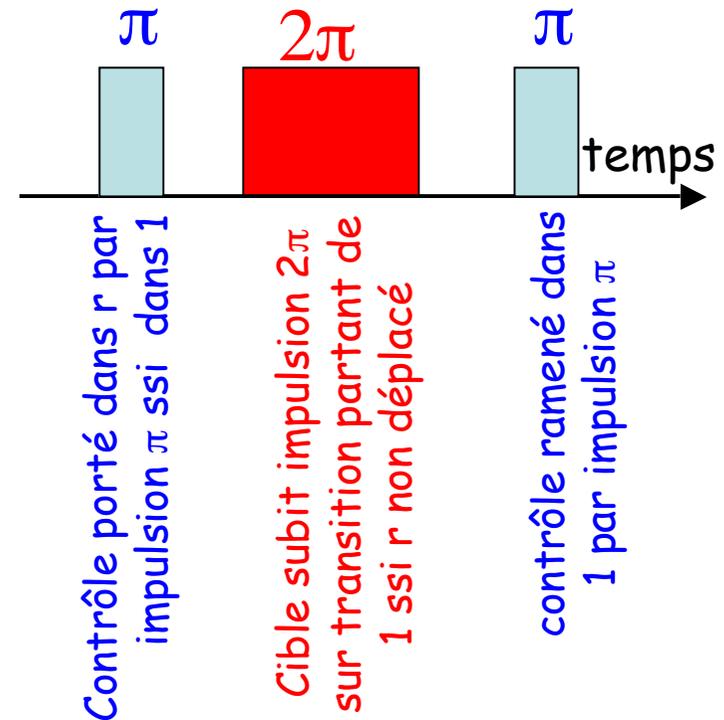
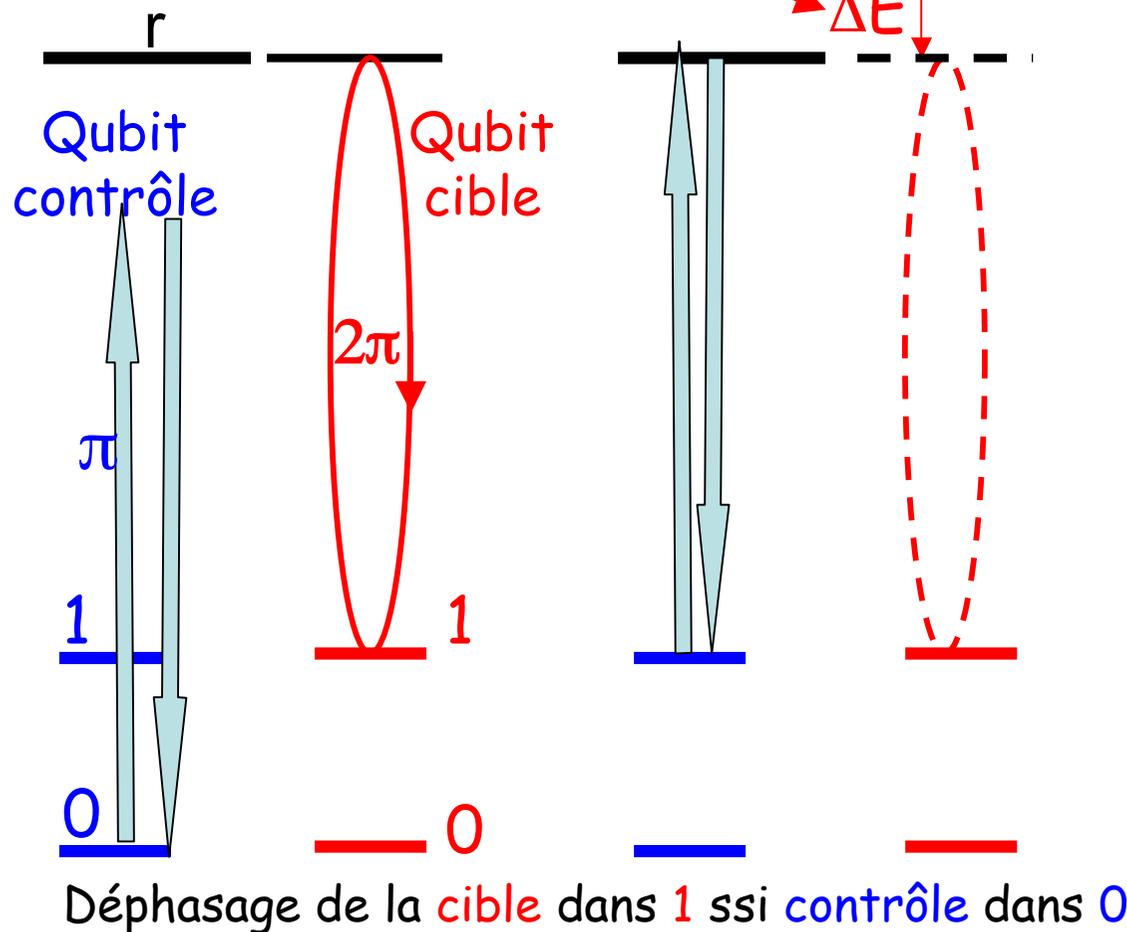


Un **atome 1** porté dans un état de Rydberg par  $L_1$  affecte l'excitation d'un **atome 2** par  $L_2$  à une distance de plusieurs microns

Les états des qubits sont couplés par l'interaction entre atomes excités qui peut **déplacer** les niveaux de Rydberg de plusieurs MHz à des distances de plusieurs micromètres. L'interaction s'effectue typiquement sur des temps de l'ordre de 100 ns à 1  $\mu$ s. Dans le cas de plusieurs atomes, l'interaction peut affecter deux atomes de l'ensemble même s'ils ne sont pas voisins: analogie avec le couplage des ions, mais ici l'interaction est de nature van der Waals ( $1/r^6$  ou  $1/r^3$ )... la taille des atomes compense la décroissance de l'interaction plus rapide que pour les ions... Cette interaction peut servir à intriquer les atomes et réaliser des portes

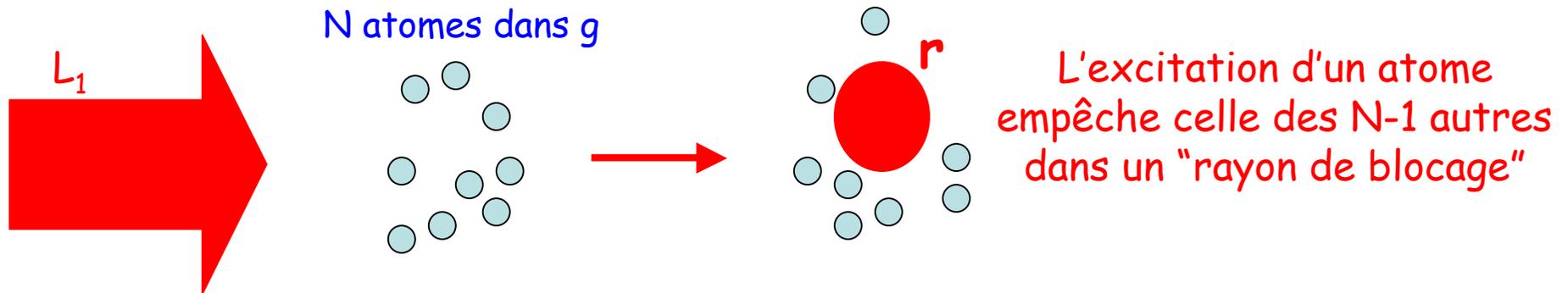
# Principe de porte entre deux atomes exploitant le "blocage" Rydberg-Rydberg

Niveau de Rydberg de la **cible** déplacé de  $\Delta E$  quand **contrôle** est excité



	$ 0,0\rangle$	$ 0,1\rangle$	$ 1,0\rangle$	$ 1,1\rangle$
$ 0,0\rangle$	1	0	0	0
$ 0,1\rangle$	0	-1	0	0
$ 1,0\rangle$	0	0	-1	0
$ 1,1\rangle$	0	0	0	-1

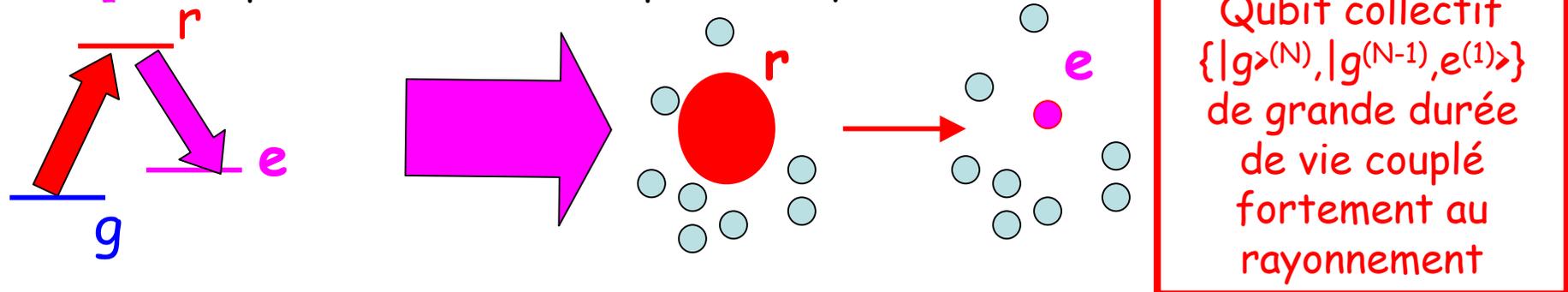
# Principe de l'intrication à plusieurs atomes exploitant le "blocage" Rydberg-Rydberg



Le pulse laser  $L_1$  couple l'état initial à une superposition d'états avec excitation partagée symétriquement par les N atomes (état intriqué de Werner):

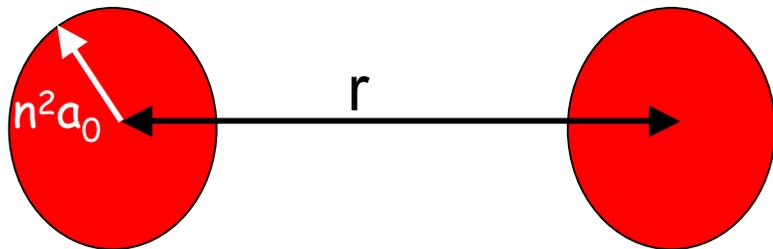
$$|g, g, \dots, g\rangle = |g\rangle^{(N)} \xrightarrow{L_1} \alpha |g\rangle^{(N)} + \beta |g^{(N-1)}; r^{(1)}\rangle \quad ; \quad |g^{(N-1)}; r^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} (|g, g, \dots, g, r\rangle + |g, g, \dots, r, g\rangle + \dots + |r, g, \dots, g\rangle)$$

Si l'état fondamental des N atomes est un qubit à 2 niveaux  $g$  et  $e$ , une impulsion laser  $L_2$  ( $\pi$ ) copie cet état dans l'espace des qubits:



$$\alpha |g\rangle^{(N)} + \beta |g^{(N-1)}; r^{(1)}\rangle \rightarrow \alpha |g\rangle^{(N)} + \beta |g^{(N-1)}; e^{(1)}\rangle \quad ; \quad |g^{(N-1)}; e^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} (|g, g, \dots, g, e\rangle + |g, g, \dots, e, g\rangle + \dots + |e, g, \dots, g\rangle)$$

# Pourquoi des atomes froids pour ces expériences?



Les atomes doivent être "gelés" pendant un temps long devant le temps d'interaction Rydberg-Rydberg

Pour  $r \sim 10\mu\text{m}$  et  $n=100$ , la fréquence de couplage Rydberg-Rydberg est typiquement de l'ordre de qqs MHz. D'autre part le couplage varie très vite avec  $r$  (en  $1/r^3$  ou  $1/r^6$ ). Pour opérer avec de bonnes fidélités, il faut que  $\Delta r/r$  reste petit pendant un temps long devant l'inverse de la fréquence de couplage. Imposer  $\Delta r/r \sim 10^{-2}$  sur  $1\mu\text{s}$  implique des vitesses atomiques inférieures à  $0,1\text{m/s}$  (températures de l'ordre de  $10\mu\text{K}$ ). Les atomes de Rydberg doivent donc être excités à partir d'atomes froids (atomes piégés dans un piège dipolaire ou dans un réseau optique).

Si le couplage Rydberg-Rydberg est transitoire, les atomes étant finalement ramenés dans un état fondamental piégeant, le déplacement des atomes pendant leur passage dans l'état de Rydberg (en général non piégé) doit également rester faible devant l'extension de la fonction d'onde atomique dans le piège, ce qui impose également des vitesses atomiques de quelques cm/s.

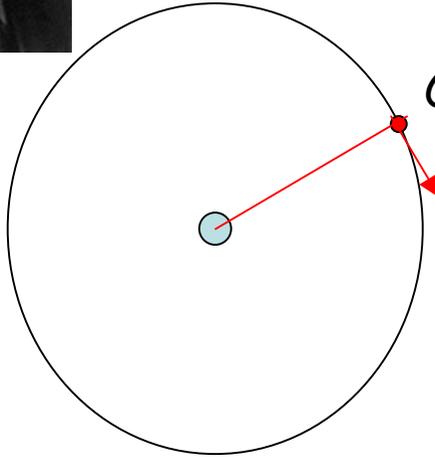
**I-B:**

**Propriétés générales des états de  
Rydberg à un électron excité**



# Rappels sur les atomes de Rydberg

Modèle semi-classique de l'Hydrogène:  
un électron gravite sur un cercle loin du cœur  
(Bohr 1913)



Condition de quantification du moment angulaire:

$$L = mvr = n\hbar \quad (n \text{ entier } \geq 1)$$

Une seconde relation relie  $v$  et  $r$   
(force centrifuge = force de Coulomb):

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$$

D'où l'on tire  $r$  et  $v$  en fonction de  $n$ :

$$r = n^2 a_0 \text{ avec } a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}; v = \frac{\hbar}{ma_0 n} = \frac{e^2}{\hbar n}$$

Et finalement l'énergie électronique:

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{2r} = -\frac{R}{n^2} \text{ avec } R = \frac{e^2}{2a_0} = \frac{me^4}{2\hbar^2}$$

*L'électron de Rydberg n'est pas relativiste  
( $v = c\alpha/n \ll c$ )*

Expressions de  $a_0, R$  et  $v$  en  
fonction de la constante de  
structure fine  $\alpha$ :

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137}$$

$$a_0 = \frac{\hbar}{mc \alpha} = \frac{\lambda_c}{\alpha} \quad v = \alpha \frac{c}{n}$$

$$R = \frac{mc^2}{2} \alpha^2$$



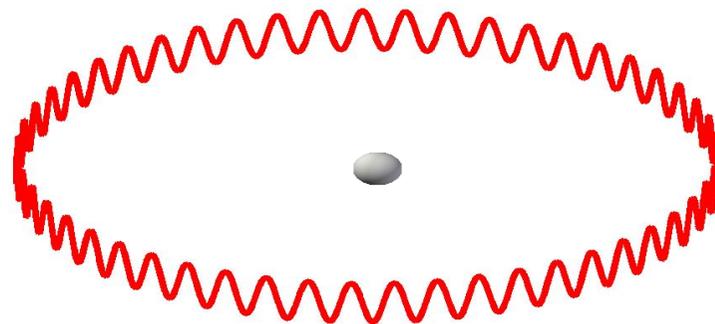
# Le modèle de Bohr interprété par de Broglie



L'électron de vitesse  $v$  a une  
longueur d'onde  $\lambda = h/mv$

La quantification de Bohr est une condition de  
résonance imposant un nombre entier de longueurs  
d'onde de de Broglie sur la circonférence:

$$n\lambda = 2\pi r \quad \rightarrow \quad mvr = n\hbar$$



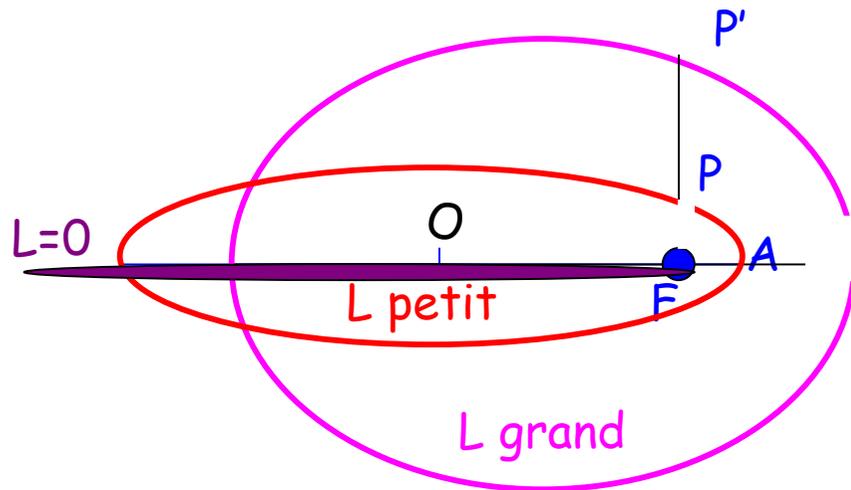
Quantification du  
moment angulaire de  
l'orbite circulaire  
égal à  $n\hbar$

Le nombre quantique principal  $n$  compte le nombre de  
longueurs d'onde autour de l'orbite circulaire.

D'après la théorie quantique exacte, le moment angulaire de l'orbite circulaire en  
unités de  $\hbar$  (et le nombre d'oscillations de la fonction d'onde le long de l'orbite  
circulaire) est  $n-1$  et non  $n$  (voir plus loin).

# Orbites elliptiques: modèle de Sommerfeld

Le modèle de Bohr de H ne considère que des orbites planétaires circulaires, correspondant au moment angulaire  $L$  maximum pour une énergie donnée. En fait, la trajectoire planétaire la plus générale dans un potentiel en  $1/r$  est elliptique (Kepler-Newton) avec comme constantes du mouvement l'énergie  $E_0$  et le moment cinétique  $L$ , qui traduisent l'invariance du Hamiltonien par translation dans le temps et par rotation autour du noyau.



Quantités ne dépendant que de l'énergie:

Grand axe	pulsation
$a = OA = -\frac{e^2}{2E_0}$	$\omega_0 = \frac{2\pi}{T_0} = \frac{(-2E_0)^{3/2}}{m^{1/2}e^2}$

Paramètre (ne dépend que de  $L$ ):

$$p = FP = \frac{L^2}{me^2}$$

A l'énergie  $E_0 = -R/n^2$  correspondent  $n$  orbites de grand axe  $a = n^2 a_0$  et moment angulaire  $0 \leq L \leq n-1$ . Les orbites de petit  $L$  (petit  $p$ ) s'approchent du noyau au périhélie. L'orbite  $L=0$  se réduit à une section de droite, l'électron "rebondissant" périodiquement sur le noyau. Pour  $n$  et  $L$  donnés, il y a  $2L+1$  orientations du plan orbital (nombre quantique azimuthal  $-L \leq m \leq L$ ). L'électron possède de plus un spin (contribuant à la structure fine des raies).

# La description quantique des états de Rydberg de H

Rappelons les propriétés essentielles des fonctions d'onde de l'hydrogène. L'équation de Schrödinger (non-relativiste) décrivant le mouvement de l'électron:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi - \frac{e^2}{r} \psi = E \psi$$

se sépare en coordonnées sphériques, les solutions se mettant sous la forme du produit d'une fonction radiale  $R_{E,L}(r)$  par une fonction angulaire (harmonique sphérique), cette séparation traduisant l'invariance du Hamiltonien par rotation et la conservation du moment angulaire:

$$\psi_{E,L,m}(r, \theta, \phi) = R_{E,L}(r) Y_L^m(\theta, \phi) \quad ; \quad R_{E,L}(r) = \frac{1}{r} u_{E,L}(r)$$

La fonction radiale  $u_{EL}(r) = r R_{EL}(r)$  obéit à une équation de Schrödinger à une dimension décrivant le mouvement d'une particule dans un potentiel somme du potentiel Coulombien  $-e^2/r$  et du potentiel centrifuge proportionnel à  $L(L+1)/r^2$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u_{E,L}(r) + \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{L(L+1)}{r^2} - \frac{e^2}{r} - E \right] u_{E,L}(r) = 0$$

# Les fonctions d'onde angulaires: harmoniques sphériques

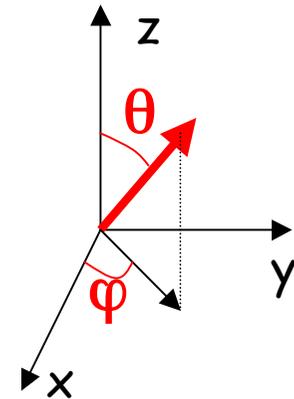
Rappel des états propres de  $L^2$  et  $L_z$ :

$$Y_L^m(\theta, \varphi) \sim P_{L,m}(\cos\theta)e^{im\varphi} \quad \text{Fonction propre de } L^2/\hbar^2 \text{ et } L_z/\hbar \text{ avec valeurs propre } L(L+1) \text{ et } m \quad (-L \leq m \leq L)$$

où les  $P_{L,m}(x)$  sont les fonctions de Legendre définies par:

$$P_{L,m}(x) = \frac{(-1)^m}{2^L L!} [1-x^2]^{m/2} \frac{d^{L+m}}{dx^{L+m}} [x^2-1]^L$$

qui s'expriment comme des polynômes des variables  $\cos\theta$  et  $\sin\theta$ .



Premières harmoniques sphériques:

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

Les fonctions d'onde de  $L=0$  (S) sont isotropes

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta ; \quad Y_1^{\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi}$$

Les fonctions  $L=1$  (P) sont  $\sim z/r$  et  $(x \pm iy)/r$

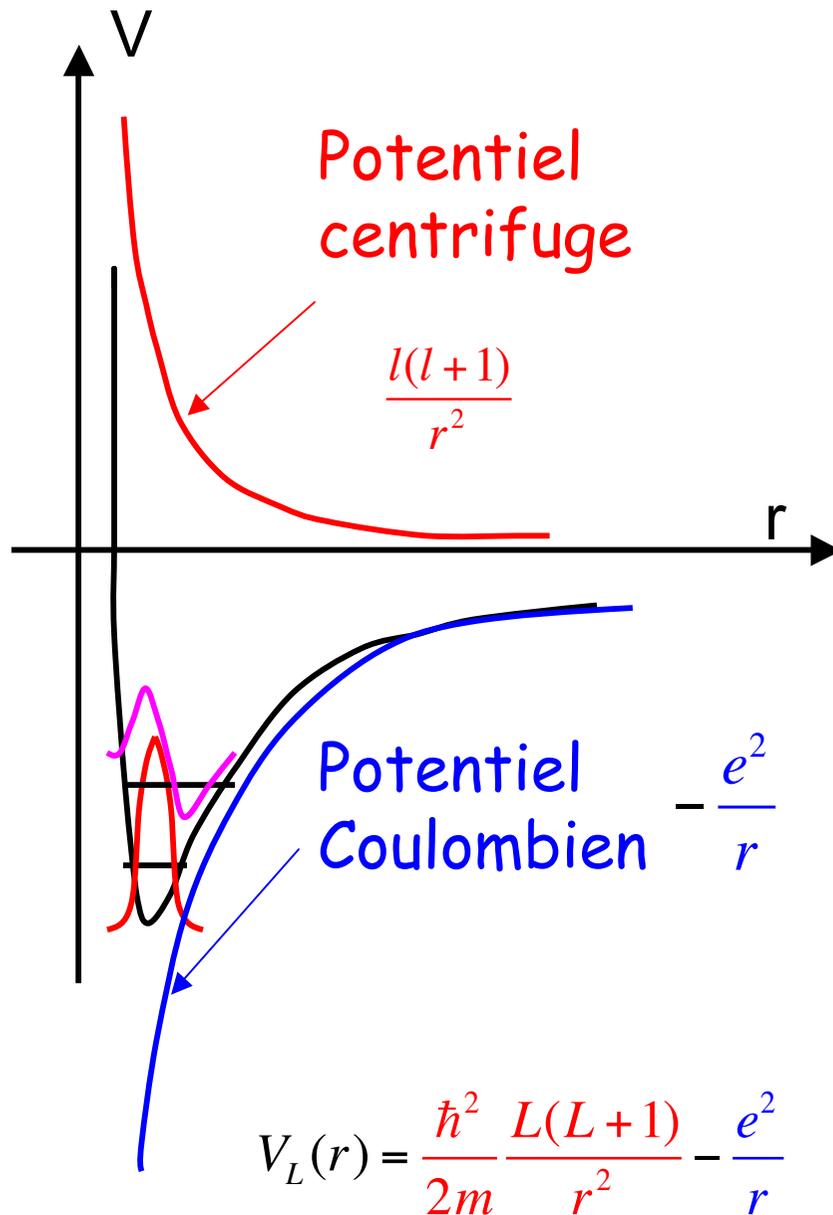
$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1); \quad Y_2^{\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\varphi}; \quad Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}$$

Les fonctions  $L=2$  (D) sont des tenseurs d'ordre 2 en  $x/r, y/r$  et  $z/r$

On utilisera plus loin la relation:

$$Y_L^L \sim \sin^L \theta e^{iL\varphi}$$

# Les fonctions d'onde radiales de H



Elles sont analytiquement calculables (Polynômes de Legendre), mais nous n'en donnons ici qu'une description qualitative

Les énergies dans le "puits de potentiel"  $V_L(r)$  sont quantifiées, les niveaux étant repérés par un indice  $k=1,2,3,\dots$

$$E_{k,L} = -\frac{R_y}{(k+L)^2}; R_y = \frac{e^2}{2a_0}$$

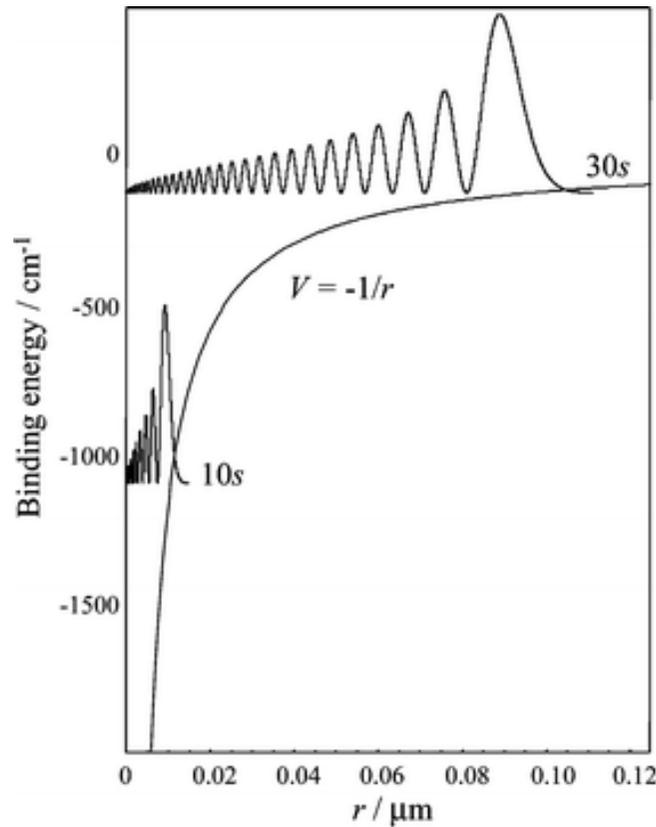
La fonction d'onde radiale  $R_{k,L}(r)$  oscille avec  $k-1$  nœuds.

Des états de  $k$  et  $L$  différents ont, pour un même  $k+L$ , la même énergie (voir plus loin). En posant  $k+L=n$  (nombre quantique principal), on met l'énergie sous la forme:

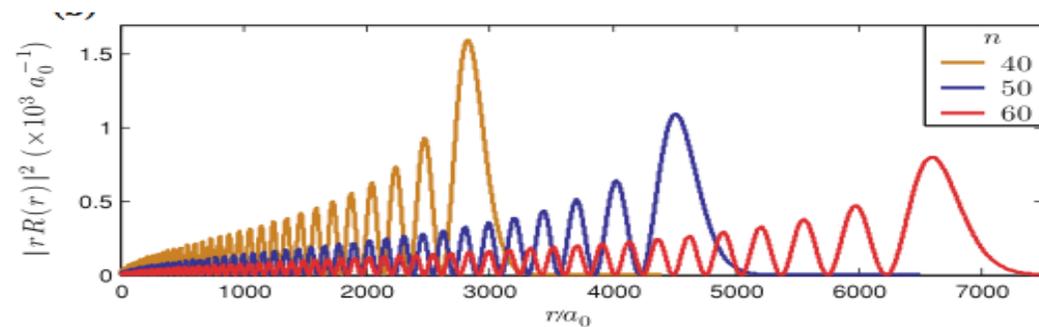
$$E_{n,L} = -\frac{R_y}{n^2}$$

et la fonction d'onde radiale  $R_{n,L}(r)$ , repérée par les indices  $L$  ( $L=0,1,2,\dots$ ) et  $n$  ( $n=L+1, L+2, \dots$ ) possède  $n-L-1$  nœuds.

# Quelques fonctions radiales de H: cas $L=0$ (états S) et $L=2$ (états D)



Carré des fonctions  
d'onde 10S et 30S  
(multipliées par  $r^2$ )



Carré des fonctions d'onde  
40D, 50D et 60D (multipliées par  $r^2$ )

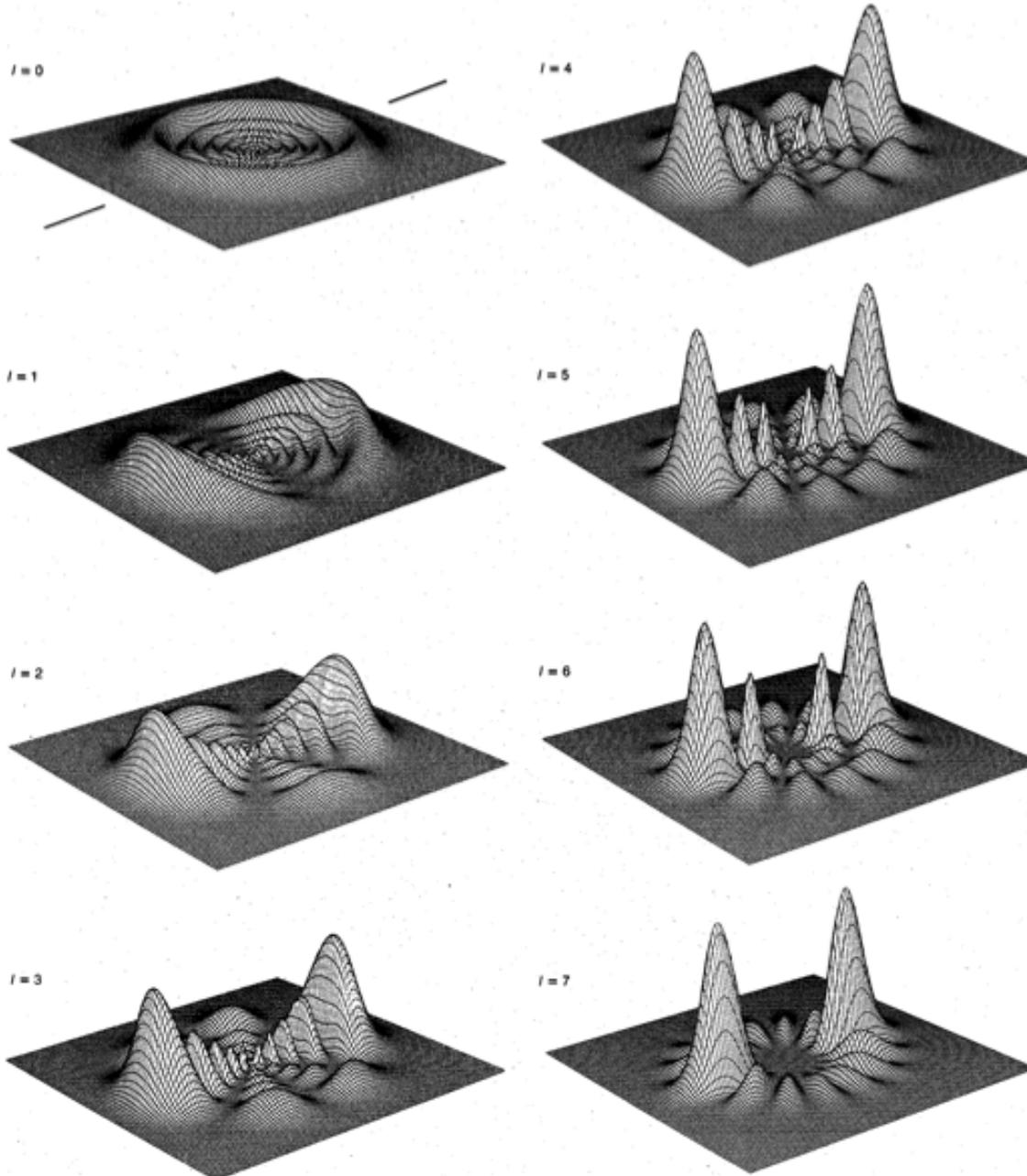
# Etats $n=8$ , $L=0$ à 7 et $m=0$

$$r^2 |\psi_{8,L,0}|^2 = r^2 R_{8,L}^2(r) |Y_L^0|^2$$

Densité électronique  
(multipliée par  $r^2$ ) dans  
un plan "méridien"  
passant par Oz

La densité électronique  
s'annule sur des cercles  
(nœuds de la fonction  
radiale) et sur des  
droites passant par le  
noyau (nœuds de  
l'harmonique sphérique)

D. Kleppner, M.G. Littman  
and M.L. Zimmerman,  
Scientific American, 244,  
130 (1981)



# L'atome de Bohr à la limite des grands nombres quantiques

## Etat "circulaire" de grand $n$ avec $L = m = n - 1$

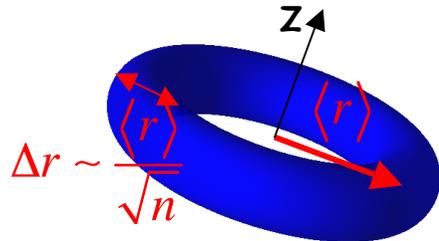
Etat le plus profond dans le puits de potentiel radial de  $L$  donné: la fonction d'onde, sans nœuds, est une courbe en cloche avec maximum en  $r \sim n^2 a_0$ . Elle est multipliée par l'harmonique sphérique  $\sin^{(n-1)}\theta$  qui est piquée à  $\theta = \pi/2$  (orbite dans le plan équatorial normal à l'axe  $Oz$ ):

$$\psi_{n,l=n-1,m=n-1}(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{(\pi a_0^3)^{1/2}} \frac{(-1)^{n-1}}{n^n n!} \left(\frac{r}{a_0}\right)^{n-1} e^{-r/na_0} \sin^{n-1} \theta e^{i(n-1)\varphi}$$

On estime facilement les valeurs moyennes et les dispersions de  $r$  et  $\theta$ :

$$\langle r \rangle \approx n^2 a_0 \quad ; \quad \Delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2} \approx n^{3/2} a_0 \quad \langle \theta \rangle = \frac{\pi}{2} \quad ; \quad \Delta \theta \approx \frac{1}{\sqrt{n}} \approx \frac{\Delta r}{\langle r \rangle}$$

L'orbitale de l'état circulaire est un tore de rayon  $\langle r \rangle = a_0 n^2$  et d'épaisseur  $\Delta r \sim \langle r \rangle / \sqrt{n}$ . Il se rapproche d'autant plus de l'orbite circulaire classique que  $n$  est plus grand ( $1/\sqrt{n} \rightarrow 0$ ).

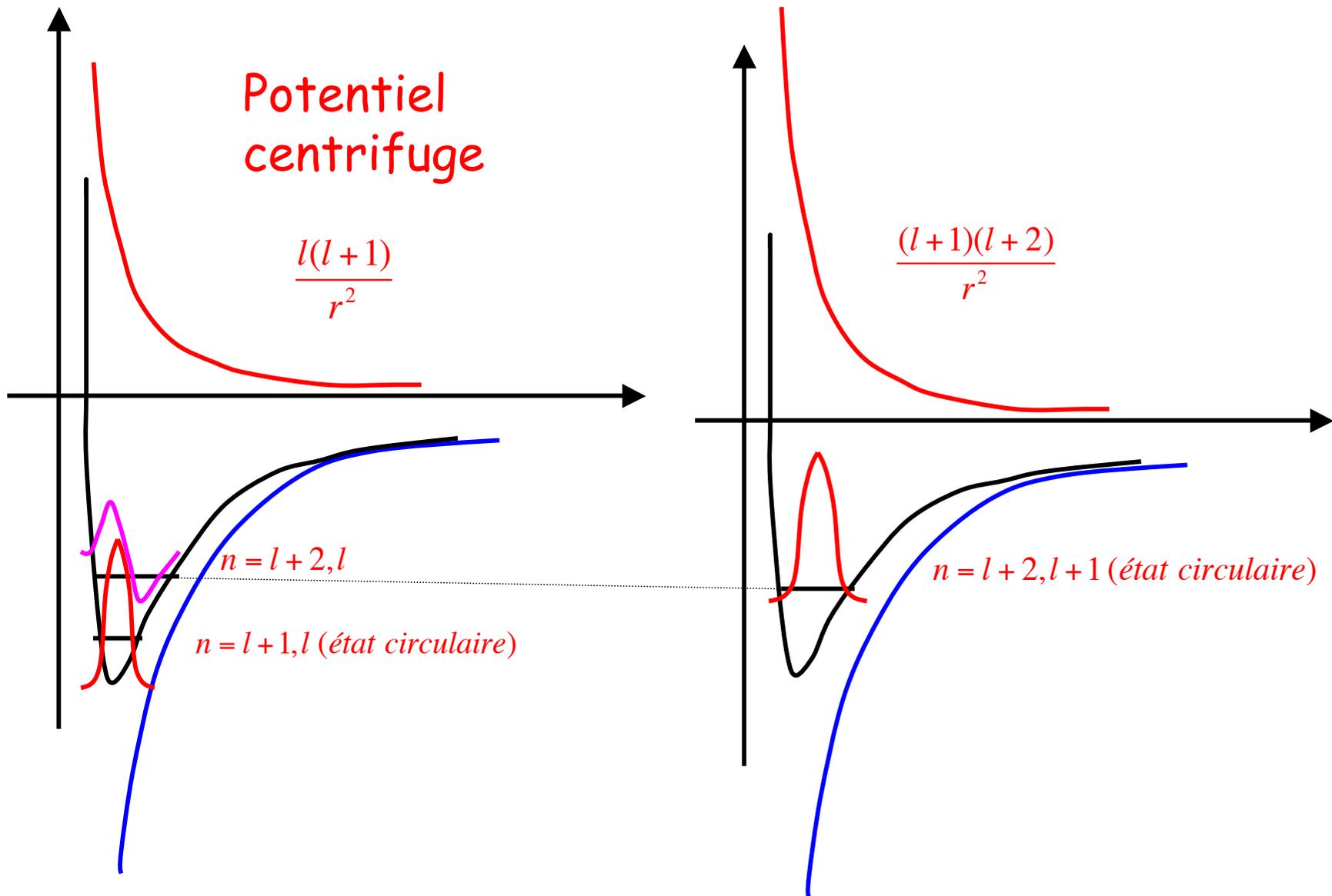


État circulaire  $m = n - 1 = 20$

La phase de la fonction d'onde oscille  $n-1$  fois le long du tore. En superposant les ondes  $m = +L$  et  $m = -L$ , on obtient une fonction d'onde stationnaire en  $\cos(n-1)\varphi$  de période  $2\pi/(n-1)$ . On retrouve le modèle de Bohr-de Broglie en remplaçant  $n$  par  $n-1$  (voir plus haut).

I-C

Les états de Rydberg des alcalins et  
les défauts quantiques



Dégénérescence des états de  $n$  donné et de  $L$  différents:  
une propriété du potentiel en  $1/r$

# Dégénérescence, invariance et symétrie: le vecteur de Runge-Lenz

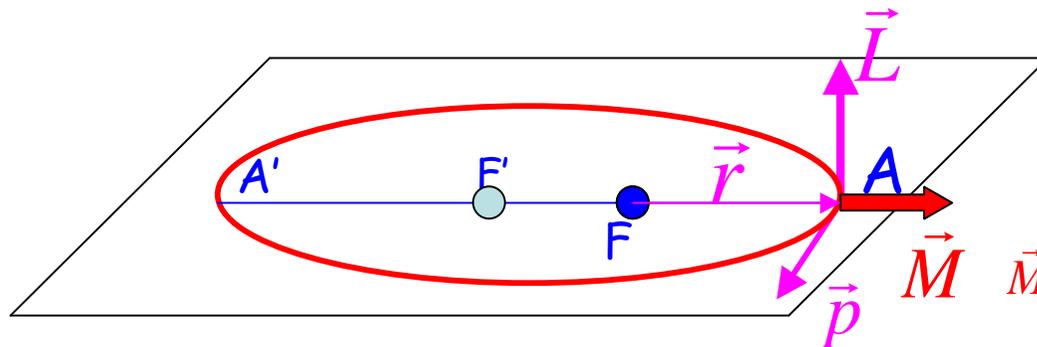
L'évolution d'une particule dans un potentiel central en  $1/r$  possède un invariant (en plus du moment cinétique  $L$ ), le vecteur de Runge-Lenz:

$$\vec{M} = \frac{1}{2m} (\vec{p} \times \vec{L}) + (\vec{L} \times \vec{p}) - e^2 \frac{\vec{r}}{r}$$

qui commute avec le Hamiltonien du mouvement:

$$[\vec{M}, H] = 0 \text{ avec } H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

Cette invariance, correspondant à une symétrie dynamique du système, explique la dégénérescence des états de  $n$  donné et de  $L$  différents. Sans en donner une démonstration, revenons sur le modèle de Sommerfeld de H pour analyser les conséquences de cette loi de conservation en mécanique classique (problème étudié, avant la MQ, dans le cas du mouvement des planètes).

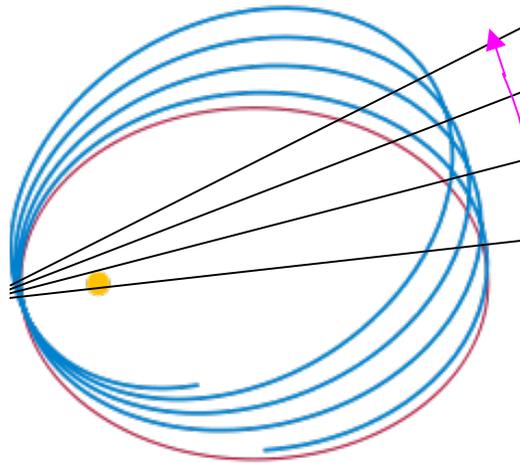


$M$  est dans le plan de l'orbite puisque  $L \times p$  et  $r$  le sont. Etant constant, on peut le calculer au périhélie. Un calcul simple donne:

$$\vec{M} = e^2 \varepsilon \vec{u} \quad \text{avec } \varepsilon = \frac{FF'}{AA'} \text{ (excentricité)}$$

et  $\vec{u}$  : vecteur unitaire le long du grand axe

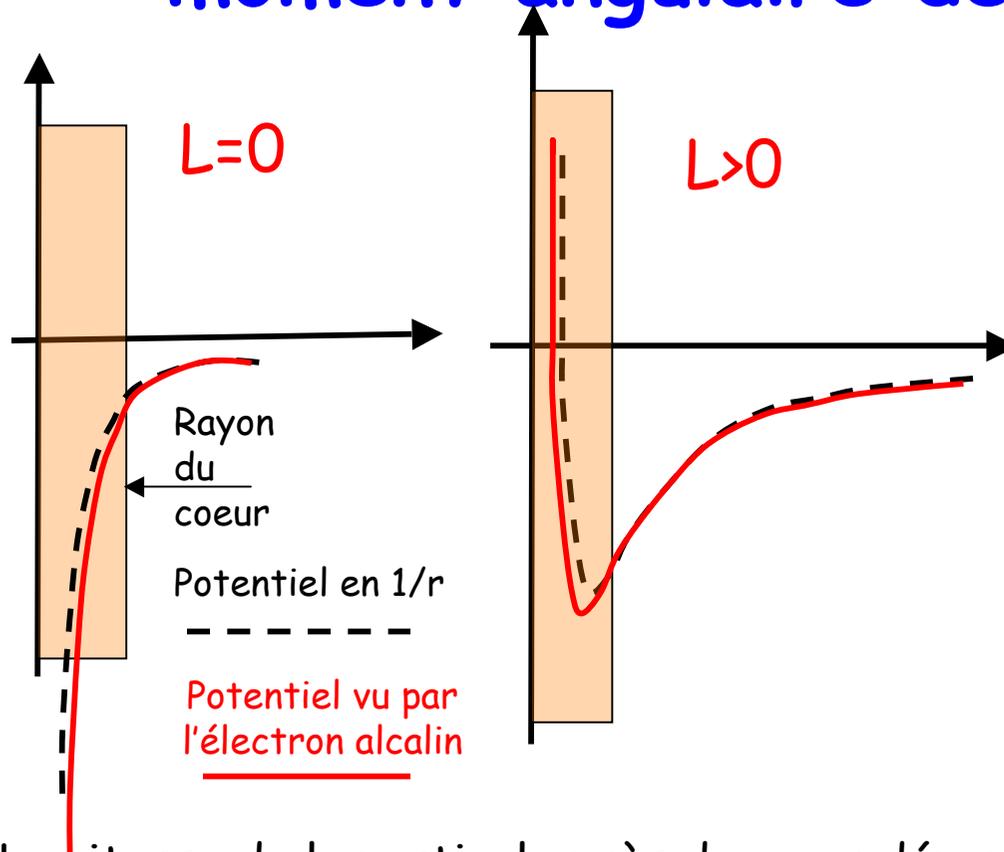
# Non-Invariance de Runge-Lenz et orbites ouvertes



L'invariance de  $M$  signifie que le grand axe de l'orbite elliptique garde une direction fixe (orbite fermée pour un potentiel en  $1/r$ ). Toute perturbation du Hamiltonien (à l'énergie cinétique ou à  $V(r)$ ) rend le vecteur de Lenz dépendant du temps et conduit à une précession de l'axe de l'orbite qui s'ouvre: explique la précession du périhélie de Mercure, due à l'effet de perturbation des autres planètes auquel s'ajoute une correction de relativité générale. La variation de la masse de l'électron avec la vitesse au voisinage du périhélie (relativité restreinte) conduit à la précession des orbites électroniques elliptiques de Sommerfeld et lève légèrement la dégénérescence des états de  $H$  de  $L$  différents (pour un calcul exact de cette structure fine, il faut tenir compte du spin de l'électron).

Pour les états de Rydberg des atomes alcalins, les orbites de faible  $L$  pénètrent à l'intérieur du cœur formé des  $Z-1$  autres électrons où règne un potentiel plus profond que  $-e^2/r$ :  $M$  n'est plus conservé et les orbites de Sommerfeld précessent. Les états de même  $n$  et de  $L$  différents ne sont plus dégénérés en énergie. La formule de Rydberg est corrigée par un défaut quantique dépendant de  $L$  (voir plus loin). La levée de dégénérescence introduit une nouvelle fréquence caractéristique (fréquence de précession de l'axe de l'orbite), liée à la non-invariance de  $M$ .

# Défaut quantique des états de faible moment angulaire des atomes alcalins



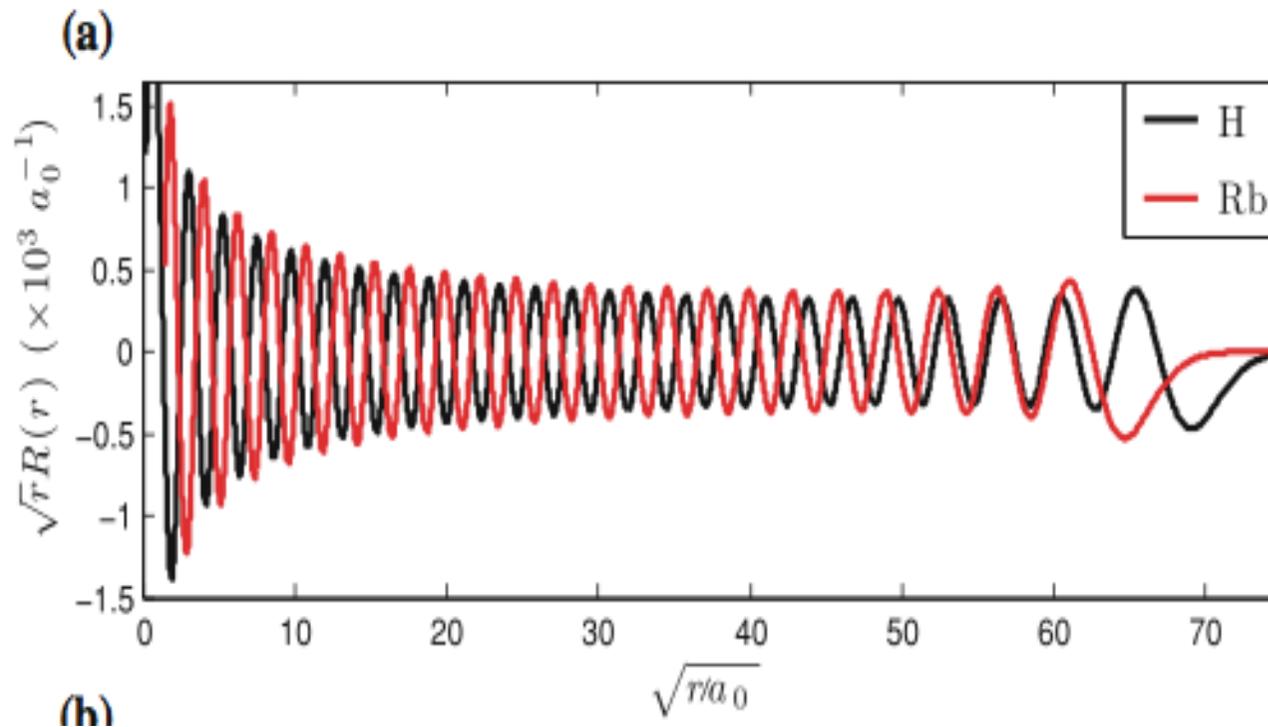
Dans le cœur, le potentiel passe de  $-e^2/r$  à  $-Ze^2/r$ : il est plus profond que celui de H, l'énergie cinétique de la particule radiale augmente et les oscillations de la fonction d'onde radiale deviennent plus rapides. Pour maintenir la condition de résonance, l'énergie change légèrement (analogie avec le changement de fréquence de résonance d'une cavité électromagnétique dans laquelle on plonge une lame diélectrique changeant l'indice du milieu).

La vitesse de la particule près du cœur dépend surtout de  $L$  et très peu de  $E$ , qui est voisin de 0: le déplacement des nœuds de la fonction d'onde dépend de  $L$  et pratiquement pas de  $n$ . Le changement d'énergie s'exprime par un défaut quantique  $\delta_L$  qui ne dépend pratiquement que de  $n$ :

$$E_{n,L} = -\frac{R_y}{n^2} \rightarrow E_{n,L} = -\frac{R_y}{(n - \delta_L)^2}$$

$\delta$  de l'ordre de 1 pour  $L = 0$  décroît avec  $L$  et devient très petit pour  $L > 2$

# Comparaison des fonctions radiales 30S de l'Hydrogène et du Rubidium ( $Z=37$ ).



## Conclusion de la première leçon

Nous avons rappelé le principe des expériences d'intrication et de portes quantiques avec des qubits atomiques et montré qualitativement comment l'interaction entre atomes de Rydberg pouvait en principe être utilisée pour réaliser une dynamique de porte quantique par blocage de l'excitation d'un atome au voisinage d'un autre. Nous avons ensuite rappelé la structure des atomes de Rydberg de l'Hydrogène et des atomes alcalins, dans le cadre de l'ancienne théorie des quanta, puis dans celui de la physique quantique non - relativiste. Nous décrirons dans la seconde leçon les propriétés "exagérées" des atomes de Rydberg en présence de champs extérieurs, statiques ou rayonnants, et nous passerons en revue des expériences exploitant ces propriétés.