



Faculté des sciences  
Département de physique

# Contribution à la théorie des champs de jauge artificiels : étude d'un système à deux atomes avec interactions dipolaires

Alexandre Cesa

Travail de fin d'études présenté  
dans le cadre de l'obtention du grade de  
Master en sciences physiques

Année académique 2012–2013



# Remerciements

Je souhaite tout d'abord remercier mon promoteur, Monsieur John Martin, pour l'aide précieuse qu'il m'a apportée dans la réalisation de ce mémoire ainsi que pour sa grande disponibilité.

Je tiens également à remercier Messieurs les Professeurs Thierry Bastin, Nicolas Vandewalle et Peter Schlagheck qui ont accepté, en leur qualité de membres du comité de lecture, d'examiner attentivement ce travail.

Je remercie également toutes les personnes qui m'ont aidé dans la relecture de ce mémoire ainsi que mes amis et ma famille qui m'ont soutenu tout au long de l'élaboration de ce travail.



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>7</b>
<b>1 Théories de jauge</b>	<b>9</b>
1.1 Théorie de l'électromagnétisme . . . . .	9
1.1.1 Approche classique . . . . .	9
1.1.2 Approche quantique . . . . .	11
1.2 Théories de jauge non-abéliennes . . . . .	14
<b>2 Approximation adiabatique et phase de Berry</b>	<b>17</b>
2.1 Le théorème adiabatique . . . . .	17
2.2 La phase de Berry . . . . .	19
2.3 Exemples . . . . .	21
<b>3 Approche semi-classique de l'interaction atome-lumière</b>	<b>23</b>
3.1 Hamiltonien d'un atome plongé dans des champs lasers . . . . .	23
3.1.1 Passage au référentiel du centre de masse . . . . .	23
3.1.2 Approximation dipolaire électrique . . . . .	24
3.1.3 Schéma d'interaction . . . . .	25
3.2 Atomes à deux niveaux . . . . .	26
3.3 Atomes à trois niveaux . . . . .	29
<b>4 Méthodes d'obtention de champs de jauge artificiels</b>	<b>33</b>
4.1 Pièges en rotation . . . . .	33
4.2 Évolution adiabatique d'états habillés . . . . .	34
4.2.1 Atomes à 2 niveaux . . . . .	34
4.2.2 Atomes à 3 niveaux . . . . .	39
4.2.3 Cas général . . . . .	42
4.2.4 Champs de jauge artificiels non-abéliens . . . . .	42
4.2.5 Première réalisation expérimentale . . . . .	43
<b>5 Champs de jauge artificiels pour deux atomes indépendants</b>	<b>45</b>
<b>6 Interactions dipolaires électriques entre deux atomes</b>	<b>47</b>
6.1 Interaction dipolaire entre atomes de Rydberg . . . . .	47
6.2 Blocage dipolaire . . . . .	49
<b>7 Champs de jauge artificiels pour deux atomes avec interactions dipolaires</b>	<b>53</b>
7.1 Régime de blocage dipolaire . . . . .	53
7.1.1 Désaccord en fréquence nul . . . . .	53
7.1.2 Désaccord en fréquence non nul . . . . .	58
7.2 Cas général . . . . .	61
7.2.1 Désaccord en fréquence nul . . . . .	63

---

7.2.2 Désaccord en fréquence non nul . . . . .	67
<b>Conclusion</b>	<b>71</b>
<b>Annexes</b>	<b>73</b>
<b>A Mouvement quantique d'une particule chargée dans des champs électromagnétiques</b>	<b>75</b>
A.1 Généralités . . . . .	75
A.2 Champ magnétique homogène . . . . .	76
A.2.1 Traitement classique . . . . .	76
A.2.2 Traitement quantique . . . . .	78
A.3 Champ électrique uniforme . . . . .	85
A.3.1 Traitement classique . . . . .	85
A.3.2 Traitement quantique . . . . .	85

# Introduction

En sciences, et plus particulièrement en physique, une majorité de phénomènes présente un degré de complexité tel qu'il est impossible d'en donner une description analytique. Néanmoins, il est possible d'appréhender ces phénomènes par le biais de simulations. L'ordinateur s'est avéré être un formidable outil pour la simulation de systèmes décrits par les lois de la mécanique classique car ceux-ci requièrent une quantité de ressources proportionnelle à leur volume. Cependant, les systèmes décrits par la mécanique quantique sont difficiles à simuler au moyen d'ordinateurs car le nombre de variables impliquées dans leur description augmente exponentiellement avec la taille du système. L'idée d'utiliser une nouvelle sorte d'ordinateur, dont les constituants de base obéissent aux lois de la mécanique quantique, afin de simuler exactement -ou émuler- la dynamique d'un autre système quantique fut initialement proposée par le physicien américain Richard Feynman [1]. La création d'un ordinateur quantique représente une tâche complexe dont la réalisation pourrait prendre encore plusieurs décennies selon les experts. Une alternative consiste à simuler un système quantique complexe au moyen d'un autre système quantique aisément contrôlable, qualifié de simulateur quantique analogique. Cette idée s'est progressivement développée et les premières propositions théoriques ont été rapidement confirmées par l'expérience [2]. Les simulateurs quantiques analogiques peuvent être construits à partir de systèmes quantiques divers, comme par exemple des ions piégés soumis à des faisceaux lasers [3], des photons intriqués couplés à des dispositifs d'optique linéaire [4] ou encore des atomes neutres évoluant dans des réseaux optiques [5] ou placés dans des cavités électromagnétiques [6]. Ces simulateurs quantiques autorisent l'étude de nombreux problèmes provenant de diverses branches de la physique telles que la physique de la matière condensée, la physique atomique, la physique quantique relativiste ou encore la cosmologie.

Les atomes neutres froids plongés dans des champs lasers constituent un choix particulièrement judicieux dans la réalisation de simulateurs quantiques de part le degré de contrôle expérimental et la flexibilité qu'ils autorisent. Néanmoins, leur neutralité électrique, les rend peu sensibles aux champs électriques et magnétiques de sorte qu'ils ne présentent pas de magnétisme orbital, ce qui constitue un frein majeur à la simulation de phénomènes issus de la physique de la matière condensée telle que l'effet Hall quantique. Il est possible de remédier à ce problème en utilisant des configurations qui génèrent des champs de jauge artificiels agissant sur des atomes neutres. De manière similaire aux champs électromagnétiques qui agissent sur les particules chargées au travers de la force de Lorentz, un champ de jauge artificiel décrit une force en tout point semblable mais agissant sur des particules neutres.

Ce mémoire traite de l'étude des champs de jauge artificiels générés par l'évolution adiabatique de l'état interne d'atomes plongés dans des champs lasers. Nous y exposerons les méthodes d'obtention de tels champs de jauge artificiels proposées dans la littérature, et dans un second temps, nous étudierons l'influence des interactions dipolaires électriques sur ces champs de jauge artificiels pour un système constitué de deux atomes.

Après avoir rappelé au chapitre 1 le formalisme général des théories de jauge en mécanique quantique non-relativiste, nous établirons les outils nécessaires à la bonne compréhension de l'émergence de champs de jauge artificiels générés par l'évolution adiabatique d'atomes plongés dans des champs lasers. Dans ce but, nous étudierons au chapitre 2 l'approximation adiabatique en mécanique quantique et nous introduirons la notion de phase de Berry qui y est intimement liée. Dans le chapitre 3, nous

détaillerons la théorie semi-classique de l'interaction d'atomes à plusieurs niveaux avec des champs lasers assimilés à des ondes électromagnétiques classiques. Au chapitre 4, nous présenterons de manière originale différentes configurations permettant de générer des champs de jauge artificiels au moyen des outils mathématiques précédemment développés. En annexe, nous discuterons du comportement quantique d'une particule chargée plongée dans des champs électrique ou magnétique.

Nous consacrerons la seconde partie de ce mémoire à l'étude des champs de jauge artificiels d'un système de deux atomes interagissant par le biais d'une interaction dipolaire électrique. Nous prendrons comme situation de référence le cas des champs de jauge artificiels émergeant pour un système de deux atomes indépendants dont l'étude fera l'objet du chapitre 5. Nous établirons au chapitre 6 l'effet de l'interaction dipolaire électrique sur l'hamiltonien décrivant la dynamique interne des deux atomes et introduirons le concept de blocage dipolaire. Enfin, le chapitre 7 sera consacré à l'étude dans différents régimes des champs de jauge artificiels qui émergent pour un système de deux atomes plongés dans des champs lasers et interagissant au moyen de l'interaction dipolaire électrique.

# Chapitre 1

## Théories de jauge

Dans ce chapitre, nous exposons le principe général des théories de jauge qui apparaissent en physique comme un concept unificateur permettant de décrire les interactions fondamentales. Ces rappels seront nécessaires à la bonne compréhension des méthodes d'obtention des potentiels de jauge artificiels générés au moyen d'atomes neutres plongés dans des champs laser. La section 1.1 est consacrée à l'étude de l'électromagnétisme en tant que théorie de jauge. Les résultats obtenus dans le cadre de la théorie de l'électromagnétisme sont généralisés aux théories de jauge non-abéliennes dans la section 1.2.

### 1.1 Théorie de l'électromagnétisme

#### 1.1.1 Approche classique

La théorie de l'électromagnétisme constitue la plus simple des théories de jauge. Commençons par étudier l'électromagnétisme d'un point de vue classique. Le mouvement d'une particule de masse  $m$  et de charge  $q$  plongée dans des champs électromagnétiques est décrit par la seconde loi de Newton

$$\mathbf{F}_{\text{Lorentz}}(t) = m \frac{d^2 \mathbf{r}(t)}{dt^2} \quad (1.1)$$

où  $\mathbf{r}(t)$  représente la position de la particule au cours du temps et  $\mathbf{F}_{\text{Lorentz}}(t)$  est la force de Lorentz

$$\mathbf{F}_{\text{Lorentz}}(t) = q[\mathbf{v}(t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}(t), t) + \mathbf{E}(\mathbf{r}(t), t)] \quad (1.2)$$

où  $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$  est la vitesse de la particule et  $\mathbf{B}$  et  $\mathbf{E}$  sont les champs magnétique et électrique. Afin d'obtenir une description complète du système "particules plus champ", il convient également de considérer les équations de Maxwell

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} &= \frac{\rho}{\epsilon_0} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{B} &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mu_0 \mathbf{j} \end{aligned} \quad (1.3)$$

où  $\epsilon_0$  est la permittivité du vide,  $\mu_0$  la perméabilité magnétique du vide,  $c$  la vitesse de la lumière dans le vide,  $\rho$  la densité de charges électriques et  $\mathbf{j}$  la densité de courants électriques [7]. Ces équations nous enseignent que les champs électrique et magnétique peuvent s'écrire en fonction d'un potentiel scalaire  $\phi$  et d'un potentiel vecteur  $\mathbf{A}$  [7]. En effet, comme  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ , il est possible d'exprimer le

champ magnétique comme le rotationnel d'un potentiel vecteur. En injectant ce résultat dans la loi de Faraday, nous obtenons l'expression du champ électrique en fonction des potentiels scalaire et vecteur,

$$\begin{aligned}\mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A}, \\ \mathbf{E} &= -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}.\end{aligned}\tag{1.4}$$

Il est intéressant de remarquer que les définitions des potentiels scalaire et vecteur contiennent une part d'arbitraire [8]. En effet, si nous effectuons la transformation, dite de jauge,

$$\begin{aligned}\mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi(\mathbf{r}, t) \\ \phi &\rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial\chi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}\end{aligned}\tag{1.5}$$

où  $\chi(\mathbf{r}, t)$  est un champ scalaire quelconque variant localement, les champs électrique et magnétique obtenus à partir de  $(\phi, \mathbf{A})$  ou de  $(\phi', \mathbf{A}')$  sont strictement identiques. En conséquence, les équations du mouvement restent identiquement les mêmes.

Les équations de Maxwell contiennent implicitement un concept important, la conservation locale de la charge électrique. En effet, en prenant la divergence de la loi d'Ampère, nous obtenons l'équation de continuité [7]

$$\frac{\partial\rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0\tag{1.6}$$

où  $\rho(\mathbf{r}, t)$  est la densité de charge et  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  la densité de courant électrique. En intégrant cette équation sur un volume donné et en appliquant le théorème de Gauss au terme contenant la divergence de la densité de courant, l'équation de continuité nous indique que la variation de la charge dans ce volume est égale au courant traversant la surface le délimitant.

Il est possible de décrire le mouvement d'une particule plongée dans des champs électromagnétiques  $\mathbf{B}$  et  $\mathbf{E}$  externes au moyen du formalisme lagrangien. Le lagrangien de ce système a pour l'expression [8]

$$L = \frac{mv^2}{2} - q(\phi + \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}).\tag{1.7}$$

L'équation de Lagrange du second ordre découlant de ce lagrangien rend bien les équations (1.1) et (1.2). Calculons l'impulsion  $\mathbf{p}$  canoniquement conjuguée à la position  $\mathbf{r}$  dont les composantes sont données par

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} \text{ avec } r_i = x, y, z\tag{1.8}$$

soit

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}.\tag{1.9}$$

Nous pouvons ainsi calculer l'hamiltonien du système

$$H = \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - L = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2m} + q\phi(\mathbf{r}, t)\tag{1.10}$$

Les deux équations d'Hamilton du premier ordre pour l'hamiltonien (1.10) sont équivalentes aux équations (1.1) et (1.2). Il est possible, en se servant de l'expression (1.9) de l'impulsion canonique, de réécrire l'hamiltonien sous la forme

$$H = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + q\phi\tag{1.11}$$

qui montre clairement que l'hamiltonien représente l'énergie totale du système, définie à une constante additive près.

### 1.1.2 Approche quantique

#### Transformation de jauge et invariance par transformation unitaire locale

Afin d'incorporer l'électromagnétisme dans le cadre de la mécanique quantique, introduisons la notion fondamentale d'invariance de jauge locale. Bien que le formalisme lagrangien soit le plus naturel dans le cadre des théories de jauge, nous utiliserons ici le formalisme hamiltonien de l'équation de Schrödinger en représentation des positions.

En mécanique quantique, le mouvement d'une particule libre sans structure interne est décrit par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.12)$$

Remarquons que si la fonction d'onde est multipliée par un facteur de phase global  $e^{i\chi}$  avec  $\chi$  un réel quelconque, l'équation de Schrödinger (1.12) reste inchangée. De plus, l'expression  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ , qui représente la densité de probabilité de présence de la particule, reste également inchangée sous l'effet d'une telle transformation. Ainsi, deux fonctions d'onde ne différant l'une de l'autre que par un facteur de phase global décrivent la même situation physique [9].

Montrons à présent que l'interaction électromagnétique ainsi que la transformation de jauge classique (1.5) apparaissent naturellement si nous imposons l'invariance de l'équation de Schrödinger sous l'effet de la transformation unitaire *locale* [9–11]

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{iq\chi(\mathbf{r}, t)/\hbar} \psi \equiv \hat{U} \psi \quad (1.13)$$

où  $\chi(\mathbf{r}, t)$  est un champ scalaire quelconque. Cette transformation est une simple transformation de phase locale de la fonction d'onde qui laisse invariante la densité de probabilité de présence. Une telle transformation appartient au groupe abélien<sup>1</sup>  $U(1)$ .

L'invariance de l'équation d'évolution ou, plus précisément, du lagrangien sous l'effet de *transformations unitaires locales* constitue le coeur de toutes les théories de jauge et est utilisée pour décrire l'électromagnétisme ainsi que les interactions faibles et fortes [10,11]. La transformation (1.13) ne laisse pas l'équation de Schrödinger (1.12) invariante. En effet, en injectant l'expression de  $\psi$  en fonction de  $\psi'$  dans l'équation (1.12), nous obtenons

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = \left[ \frac{(-i\hbar \nabla - q \nabla \chi)^2}{2m} - q \frac{\partial}{\partial t} \chi \right] \psi'. \quad (1.14)$$

Afin que l'équation de Schrödinger reste invariante sous l'effet de la transformation de phase locale (1.13), il est nécessaire de la modifier de manière à compenser les termes supplémentaires qui apparaissent sous l'action de cette transformation. Dans ce but, introduisons la dérivée covariante [10,11], séparée ici en composantes spatiales et temporelle

$$\begin{aligned} \mathcal{D} &= \nabla - \frac{iq}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \\ \mathcal{D}_t &= \frac{\partial}{\partial t} + \frac{iq}{\hbar} \phi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1.15)$$

où les champs  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  et  $\phi(\mathbf{r}, t)$  sont réels. Cet opérateur porte le nom de dérivée covariante car nous imposons à  $\mathcal{D}|\psi\rangle$  et  $\mathcal{D}_t|\psi\rangle$  de se transformer sous l'effet de (1.13) de la même manière que la fonction d'onde [10,11],

$$\begin{aligned} \mathcal{D}\psi &\rightarrow (\mathcal{D}\psi)' = e^{iq\chi(\mathbf{r}, t)/\hbar} \mathcal{D}\psi = \hat{U} \mathcal{D}\psi = \hat{U} \mathcal{D} \hat{U}^{-1} \psi' \\ \mathcal{D}_t\psi &\rightarrow (\mathcal{D}_t\psi)' = e^{iq\chi(\mathbf{r}, t)/\hbar} \mathcal{D}_t\psi = \hat{U} \mathcal{D}_t\psi = \hat{U} \mathcal{D}_t \hat{U}^{-1} \psi' \end{aligned} \quad (1.16)$$

1. Un groupe est dit abélien si tous ses éléments commutent entre eux.

ce qui impose aux opérateurs  $\mathcal{D}$  et  $\mathcal{D}_t$  de se transformer comme des vecteurs,

$$\begin{aligned}\mathcal{D} &\rightarrow \mathcal{D}' = \hat{U}\mathcal{D}\hat{U}^{-1} \\ \mathcal{D}_t &\rightarrow \mathcal{D}'_t = \hat{U}\mathcal{D}_t\hat{U}^{-1}.\end{aligned}\tag{1.17}$$

En injectant les expressions de  $\mathcal{D}$  et de  $\mathcal{D}_t$  en fonction de  $(\mathbf{A}, \phi)$ , de  $\mathcal{D}'$  et de  $\mathcal{D}'_t$  en fonction de  $(\mathbf{A}', \phi')$  ainsi que celle de  $\hat{U}$  et  $\hat{U}^{-1}$  dans la loi de transformation (1.17), nous obtenons l'effet de la transformation unitaire locale (1.13) sur les champs  $\mathbf{A}$  et  $\phi$  [10, 11]

$$\begin{aligned}\mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi, \\ \phi &\rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t}.\end{aligned}\tag{1.18}$$

Cette transformation est identique à la transformation de jauge classique (1.5). Afin de rendre l'équation d'évolution (1.12) invariante sous la transformation de phase locale (1.13), nous pouvons effectuer la substitution  $\nabla \rightarrow \mathcal{D}$  et  $\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \mathcal{D}_t$  appelée couplage minimum [9–11]. Nous obtenons ainsi l'équation de Schrödinger modifiée

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left[ \frac{(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2m} + q\phi(\mathbf{r}, t) \right] \psi.\tag{1.19}$$

Remarquons que l'hamiltonien de couplage minimum possède la même forme que l'hamiltonien d'une particule classique plongée dans des champs électromagnétiques (1.10). Les champs  $\mathbf{A}$  et  $\phi$  correspondent donc aux potentiels vecteur et scalaire de l'électromagnétisme classique. De plus, la transformation de phase locale (1.13) appliquée à (1.19) nous mène à

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi' &= \left[ \frac{(-i\hbar\nabla - q(\mathbf{A} + \nabla\chi))^2}{2m} + q\left(\phi - \frac{\partial\chi}{\partial t}\right) \right] \psi' \\ &= \left[ \frac{(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}')^2}{2m} + q\phi' \right] \psi'\end{aligned}\tag{1.20}$$

ce qui montre que l'équation d'évolution (1.19) garde la même forme pour autant que les potentiels vecteur et scalaire soient modifiés au moyen de la transformation de jauge (1.18) [9].

En conclusion, nous venons de montrer qu'il est possible d'introduire l'interaction électromagnétique en imposant l'invariance de l'équation d'évolution d'un système quantique par une transformation de phase locale, également appelée *transformation de jauge*. Le prix à payer est de modifier l'équation d'évolution en faisant apparaître les potentiels vecteur et scalaire au travers de la dérivée covariante [10, 11]. Les transformations de jauge en mécanique quantique transforment les potentiels vecteur et scalaire mais également la fonction d'onde. Elles s'écrivent

$$\begin{cases} \psi \rightarrow \psi' = e^{iq\chi(\mathbf{r}, t)/\hbar}\psi \\ \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi \\ \phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t} \end{cases}\tag{1.21}$$

avec  $\chi(\mathbf{r}, t)$  un champ scalaire quelconque [8–11].

Notons encore que les champs électrique et magnétique peuvent être définis à partir des commutateurs des dérivées covariantes,

$$\begin{aligned}E_k\hat{\mathbf{1}} &= \frac{\hbar}{iq}[\mathcal{D}_t, \mathcal{D}_k] = \left( -\frac{\partial\phi}{\partial x_k} - \frac{\partial A_k}{\partial t} \right) \hat{\mathbf{1}} \\ B_k\hat{\mathbf{1}} &= -\frac{\hbar}{2iq}\epsilon_{ijk}[\mathcal{D}_i, \mathcal{D}_j] = (\nabla \times \mathbf{A})_k\hat{\mathbf{1}}\end{aligned}\tag{1.22}$$

où les indices  $i, j$  et  $k$  courent sur  $x, y$  et  $z$  et où

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{si } (ijk) = (x, y, z), (z, x, y) \text{ ou } (y, z, x) \\ -1 & \text{si } (ijk) = (x, z, y), (y, x, z) \text{ ou } (z, y, x) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.23)$$

est le symbole de Levi-Civita [11]. Nous obtenons les mêmes expressions pour  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  que celles obtenues au moyen des relations (1.4).

### Notion de grandeur physique

Pour qu'une grandeur ait un sens physique, c'est-à-dire soit mesurable, il est nécessaire qu'elle ne dépende pas du choix de jauge effectué. En d'autres termes, il faut que les résultats de mesure et donc les valeurs propres de l'opérateur associé à une grandeur physique soient invariants de jauge [9]. Un opérateur  $\hat{O}_\chi = \hat{O}(\mathbf{A}_\chi, \phi_\chi)$ <sup>2</sup> est dit de forme invariante sous une transformation unitaire locale  $\hat{U} = \exp(iq\chi(\mathbf{r}, t)/\hbar)$  si

$$\hat{O}_{\chi'} = \hat{U} \hat{O}_\chi \hat{U}^\dagger \quad (1.24)$$

avec les potentiels vecteur et scalaire modifiés suivant la transformation (1.21). Montrons que pour un opérateur hermitique vérifiant (1.24), les résultats de mesures possibles de la grandeur physique associée ne dépendent pas du choix de la jauge. Soit  $o_n$  une valeur propre de  $\hat{O}_\chi$  de vecteur propre  $|\phi_{\chi, n}\rangle$ , c'est-à-dire

$$\hat{O}_\chi |\phi_{\chi, n}\rangle = o_n |\phi_{\chi, n}\rangle. \quad (1.25)$$

Si l'opérateur  $\hat{O}_\chi$  est de forme invariante, la valeur propre  $o_n$  est invariante de jauge car

$$\begin{aligned} \hat{O}_{\chi'} |\phi_{\chi', n}\rangle &= \hat{U} \hat{O}_\chi \hat{U}^\dagger \hat{U} |\phi_{\chi, n}\rangle \\ &= \hat{U} \hat{O}_\chi |\phi_{\chi, n}\rangle \\ &= \hat{U} o_n |\phi_{\chi, n}\rangle \\ &= o_n |\phi_{\chi', n}\rangle. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Il est aisé de vérifier que l'opérateur vitesse  $\hat{\mathbf{v}}$  représente une grandeur physique alors que l'opérateur impulsion  $\hat{\mathbf{p}}$  est non-physique [8, 9]. De même, l'hamiltonien en l'absence de potentiel scalaire,  $\hat{H} = \hat{H} - q\phi = [\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2/2m = \hat{\mathbf{v}}^2/2m$ , représente également une grandeur physique, ce qui n'est plus le cas de l'hamiltonien total.

### Équation de continuité et densité de courant de probabilité

Intéressons-nous à l'analogie quantique de l'équation de continuité (1.6). Partant de l'équation de Schrödinger (1.19), il est possible de montrer que l'évolution quantique satisfait à l'équation de continuité

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (1.27)$$

avec  $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$  la densité de probabilité de trouver la particule à la position  $\mathbf{r}$  à l'instant  $t$  et

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{2m} [\psi^*(\mathbf{r}, t)(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))\psi(\mathbf{r}, t) + c.c.] \\ &= \frac{1}{m} \Re[\psi^*(\mathbf{r}, t)(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))\psi(\mathbf{r}, t)] \end{aligned} \quad (1.28)$$

la densité de courant de probabilité de présence [9, 12], où *c.c.* désigne le complexe conjugué. L'équation de continuité (1.27) exprime la conservation locale de la densité de probabilité de présence de la

2.  $\chi(\mathbf{r}, t)$  est la fonction scalaire spécifiant le choix de jauge.

particule. Si nous décomposons la fonction d'onde comme le produit de son module et d'un facteur de phase,  $\psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\rho}e^{iS/\hbar}$ , la densité de courant de probabilité prend la forme simple [13]

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho}{m}(\nabla S - q\mathbf{A}). \quad (1.29)$$

Les densités de charge et de courant électrique correspondantes sont obtenues en multipliant  $\rho$  et  $\mathbf{j}$  par la charge  $q$  de la particule. Remarquons que l'équation de continuité peut être vue comme une conséquence directe de la symétrie de jauge. En effet, le théorème de Noether nous indique qu'à toute symétrie du lagrangien est associée un courant conservé, en l'occurrence, la symétrie de jauge de l'électromagnétisme entraîne la conservation de la charge électrique [11].

## 1.2 Théories de jauge non-abéliennes

Il est possible de généraliser le développement précédent à des systèmes décrits par des fonctions d'onde à plusieurs composantes. La généralisation du formalisme des théories de jauge a été proposée initialement par Yang et Mills afin d'expliquer la symétrie d'isospin entre le proton et le neutron et a été appliquée avec succès à la description des interactions forte et faible [10, 14].

Considérons le cas d'un système décrit par une fonction d'onde à deux composantes

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \text{ et } \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) = (\psi_1^*(\mathbf{r}, t), \psi_2^*(\mathbf{r}, t)). \quad (1.30)$$

De manière analogue au fait que pour une fonction d'onde à une composante la probabilité de présence de la particule reste la même lorsque la fonction d'onde est multipliée par un facteur de phase global, dans le cas d'une fonction d'onde à deux composantes, la grandeur  $\Psi^\dagger\Psi$  est invariante sous l'effet de la transformation [10, 11]

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \Psi'(\mathbf{r}, t) = \hat{U}\Psi(\mathbf{r}, t) \\ \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \Psi'^\dagger(\mathbf{r}, t) = \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\hat{U}^\dagger \end{aligned} \quad (1.31)$$

où  $\hat{U}$  une matrice unitaire  $2 \times 2$ , telle que

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{\mathbf{1}}. \quad (1.32)$$

Toute matrice unitaire  $2 \times 2$  peut s'écrire sous la forme

$$\hat{U} = e^{i\hat{H}} \quad (1.33)$$

avec  $\hat{H}$  une matrice hermitique ( $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ ) [10]. De plus, toute matrice hermitique  $2 \times 2$  peut s'écrire en fonction de 4 paramètres réels  $\theta, \alpha^i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) [10]

$$\hat{H} = \theta\hat{\mathbf{1}} + \frac{g}{\hbar} \sum_{i=1}^3 \alpha^i \tau^i = \theta\hat{\mathbf{1}} + \frac{g}{\hbar} \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (1.34)$$

où  $\hat{\mathbf{1}}$  est la matrice identité  $2 \times 2$ ,  $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3)$ ,  $\boldsymbol{\tau} = (\tau^1, \tau^2, \tau^3)$  avec

$$\tau^1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tau^2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \tau^3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.35)$$

Dans (1.34),  $g$  représente une constante de couplage qui joue le même rôle que la charge électrique en électromagnétisme. Remarquons que les matrices  $\tau^i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) sont égales à la moitié des matrices de Pauli  $\sigma_i$ . En résumé, toute matrice unitaire  $2 \times 2$  peut s'écrire sous la forme [10]

$$\hat{U} = e^{i\theta} e^{ig\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\tau} / \hbar}. \quad (1.36)$$

Le terme de phase  $\exp(i\theta)$  de (1.36) donnera lieu à l'interaction électromagnétique si nous rendons la transformation locale et imposons l'invariance de l'équation d'évolution. Nous ne nous préoccupons donc plus de ce terme et nous concentrerons sur la transformation unitaire

$$\hat{S} = e^{ig\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\tau}/\hbar} \quad (1.37)$$

avec  $\det \hat{S} = 1$ . Une telle matrice appartient au groupe  $SU(2)$ . Le groupe  $SU(2)$  est dit non-abélien car l'application successive de deux transformations appartenant à ce groupe conduit à des résultats différents si l'ordre d'application des transformations change. Les matrices  $\tau^i$  sont appelées les générateurs du groupe.

Regardons ce qui se passe si nous imposons l'invariance de l'équation de Schrödinger sous l'effet de la *transformation unitaire locale*<sup>3</sup> ( $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{r}, t)$ )

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \Psi'(\mathbf{r}, t) = e^{ig\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{r}, t)\cdot\boldsymbol{\tau}/\hbar}\Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{S}(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.38)$$

où la fonction d'onde possède maintenant deux composantes et est donnée par l'expression (1.30). Comme dans le cas de l'électromagnétisme, il est possible de montrer que l'équation de Schrödinger libre (1.12) n'est pas invariante sous la transformation (1.38) [10, 11]. Afin de rendre l'équation de Schrödinger invariante sous l'effet de transformations unitaires locales, nous effectuons la substitution  $\nabla \rightarrow \mathcal{D}$  et  $\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \mathcal{D}_t$  avec la dérivée covariante [10, 11]

$$\begin{aligned} \mathcal{D} &= \nabla \hat{\mathbb{1}} - \frac{ig}{\hbar} \mathbf{A}^i(\mathbf{r}, t) \tau^i \\ \mathcal{D}_t &= \frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathbb{1}} + \frac{ig}{\hbar} \phi^i(\mathbf{r}, t) \tau^i. \end{aligned} \quad (1.39)$$

où  $\hat{\mathbb{1}}$  est l'opérateur identité agissant sur les degrés de liberté internes et où nous avons utilisé la convention de sommation d'Einstein  $\mathbf{A}^i(\mathbf{r}, t) \tau^i = \sum_i \mathbf{A}^i(\mathbf{r}, t) \tau^i$ . Il est ici nécessaire d'introduire trois potentiels scalaires et trois potentiels vecteurs ( $\phi^i, \mathbf{A}^i$ ) car la transformation unitaire dépend de trois paramètres.

Comme dans le cas abélien, nous imposons à la dérivée covariante de vérifier

$$\begin{aligned} \mathcal{D}\Psi &\rightarrow (\mathcal{D}\Psi)' = S(\mathcal{D}\Psi) \\ \mathcal{D}_t\Psi &\rightarrow (\mathcal{D}_t\Psi)' = S(\mathcal{D}_t\Psi) \end{aligned} \quad (1.40)$$

ce qui impose aux opérateurs  $\mathcal{D}$  et  $\mathcal{D}_t$  de se transformer comme des vecteurs (c.f. équation (1.17)). Comme nous l'avons fait pour l'électromagnétisme, il est possible d'obtenir l'effet de la transformation unitaire locale (1.37) sur les champs  $\mathbf{A}^i$  et  $\phi^i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) [10, 11]

$$\begin{aligned} \tau^i \mathbf{A}^i &\rightarrow \tau^i \mathbf{A}^{i'} = S(\tau^i \mathbf{A}^i) S^{-1} - i \frac{\hbar}{g} (\nabla S) S^{-1} \\ \tau^i \phi^i &\rightarrow \tau^i \phi^{i'} = S(\tau^i \phi^i) S^{-1} + i \frac{\hbar}{g} \left( \frac{\partial}{\partial t} S \right) S^{-1} \end{aligned} \quad (1.41)$$

ou, en utilisant l'expression de  $S$ ,

$$\begin{aligned} \tau^i \mathbf{A}^i &\rightarrow \tau^i \mathbf{A}^{i'} = \tau^i \mathbf{A}^i + \tau^i \nabla \alpha^i + \frac{ig}{\hbar} \alpha^j \mathbf{A}^k [\tau^j, \tau^k] \\ \tau^i \phi^i &\rightarrow \tau^i \phi^{i'} = \tau^i \phi^i - \tau^i \frac{\partial \alpha^i}{\partial t} + \frac{ig}{\hbar} \alpha^j \phi^k [\tau^j, \tau^k]. \end{aligned} \quad (1.42)$$

Cette transformation ressemble à la transformation (1.18) des potentiels scalaire et vecteur en électromagnétisme mais un terme supplémentaire contenant le commutateur des générateurs et mélangeant

3. En général, l'invariance du lagrangien sous la transformation (1.38) est imposée

les trois potentiels  $(\phi^i, \mathbf{A}^i)$  apparaît. L'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left[ \frac{(-i\hbar \nabla - g\tau^i \mathbf{A}^i(\mathbf{r}, t))^2}{2m} + g\tau^i \phi^i(\mathbf{r}, t) \right] \Psi. \quad (1.43)$$

est invariante sous l'effet de la transformation de jauge (1.38) pour autant que les potentiels scalaires et vecteurs  $(\phi^i, \mathbf{A}^i)$  se transforment conformément à l'équation (1.42) [10, 11].

Il est possible de définir l'analogie non-abélien des champs électrique et magnétique à partir des commutateurs des dérivées covariantes

$$\begin{aligned} \tau^i E_k^i &= \frac{\hbar}{ig} [\mathcal{D}_t, \mathcal{D}_k] \\ \tau^i B_k^i &= -\frac{\hbar}{2ig} \epsilon_{ijk} [\mathcal{D}_l, \mathcal{D}_j] \end{aligned} \quad (1.44)$$

où  $i = 1, 2, 3$  et  $k$  court sur  $x, y$  et  $z$  [10, 11]. Comme dans le cas de l'électromagnétisme, l'invariance du lagrangien par transformation unitaire implique une équation de continuité [11].

Il est possible de généraliser les résultats que nous venons d'obtenir à une fonction d'onde possédant  $N$  composantes. Le raisonnement est dans ce cas strictement identique. La seule différence provient du fait qu'il est nécessaire de considérer des matrices  $N \times N$  représentant des transformations unitaires du groupe  $SU(N)$ . Le groupe  $SU(N)$  possédant  $N^2 - 1$  générateurs, l'invariance de jauge donnera lieu dans cette situation à  $N^2 - 1$  potentiels  $(\mathbf{A}^i, \phi^i)$  [10, 14].

## Chapitre 2

# Approximation adiabatique et phase de Berry

L'approximation adiabatique est une approche qui s'applique aux systèmes dont l'évolution temporelle est gouvernée par des paramètres externes qui varient lentement dans le temps. Par exemple, en mécanique classique, le mouvement d'un pendule parfait dont le point d'attache se déplace doucement et sans à coup constitue un bon exemple de système pouvant être traité dans le cadre de l'approximation adiabatique [15]. En mécanique quantique, le comportement d'un électron plongé dans un champ magnétique qui est renversé lentement est un bon candidat pour l'application de l'approximation adiabatique [15,16]. La notion de lenteur d'un processus étant relative, il est nécessaire de la préciser. Dans le cas du pendule, nous dirons du mouvement du support qu'il est lent si le temps caractéristique de ce mouvement est grand par rapport à la période d'oscillation du pendule. Pour des électrons plongés dans un champ magnétique, le retournement du champ magnétique pourra être considéré comme lent si le temps nécessaire pour effectuer ce retournement est grand par rapport à l'inverse de la fréquence de transition entre les états spin up et spin down. En toute généralité, pour pouvoir appliquer l'approximation adiabatique, il est nécessaire que le temps de variation des conditions externes auxquelles le système est soumis soit beaucoup plus grand que le temps caractéristique lié à la dynamique interne du système. En mécanique quantique, l'approximation adiabatique est formulée de manière précise sous la forme du théorème adiabatique qui fait l'objet de la section 2.1. La section 2.2 est consacrée au concept de phase géométrique ou de Berry qui émerge lorsqu'un système quantique parcourt une boucle fermée dans l'espace des paramètres. Dans la section 2.3, nous illustrons ces concepts par plusieurs exemples, dont l'effet du renversement adiabatique du champ magnétique sur une particule de spin  $1/2$ .

### 2.1 Le théorème adiabatique

Considérons un système dont l'hamiltonien évolue de manière continue au cours du temps de  $\hat{H}_i$  vers  $\hat{H}_f$ . Supposons, de plus, que le spectre de l'hamiltonien  $\hat{H}(t)$  est discret, non-dégénéré et que les différentes valeurs propres de  $\hat{H}(t)$  restent distinctes au cours du temps. Le théorème adiabatique nous enseigne que si le système est initialement dans le  $k^e$  état propre de  $\hat{H}(0)$ , il restera au cours de son évolution temporelle dans le  $k^e$  état propre de  $\hat{H}(t)$  à un facteur de phase près [16].

Bien que le théorème adiabatique semble assez naturel, il est assez délicat à démontrer. Une démonstration complète et rigoureuse de ce théorème peut être trouvée dans la référence [16]. Nous suivrons ici le raisonnement proposé dans [15].

Si l'hamiltonien du système ne dépend pas du temps, il est bien connu que lorsque le système est initialement dans un état propre  $|n\rangle$  de l'hamiltonien, de valeur propre  $E_n$ , son évolution au cours du

temps est donnée par

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_n t/\hbar}|n\rangle. \quad (2.1)$$

Le système reste dans le même état propre de l'hamiltonien, à un facteur de phase près. Pour un hamiltonien dépendant du temps, les valeurs et vecteurs propres de  $\hat{H}(t)$  définis par l'équation

$$\hat{H}(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle \quad (2.2)$$

dépendent généralement aussi du temps. Les vecteurs propres  $|n(t)\rangle$  sont orthonormés et forment une base de l'espace d'Hilbert. La solution générale de l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \quad (2.3)$$

peut toujours s'écrire sous la forme

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n(t)\rangle \quad (2.4)$$

où nous choisissons

$$\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'. \quad (2.5)$$

En injectant l'expression (2.4) de la fonction d'onde dans l'équation de Schrödinger (2.3) et en projetant sur le  $m^e$  état propre  $|m(t)\rangle$ , nous obtenons

$$\frac{d}{dt} c_m(t) = - \sum_n c_n(t) \langle m(t) | \frac{d}{dt} n(t) \rangle e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))}. \quad (2.6)$$

Prenons la dérivée par rapport au temps de l'équation (2.2) et projetons le résultat ainsi obtenu sur l'état  $|m(t)\rangle$  ( $m \neq n$ ). Nous obtenons

$$\langle m | \left( \frac{d}{dt} \hat{H} \right) | n \rangle = (E_n(t) - E_m(t)) \langle m(t) | \frac{d}{dt} n(t) \rangle \quad (2.7)$$

En injectant ce résultat dans l'équation (2.6), nous arrivons au résultat exact

$$\frac{d}{dt} c_m(t) = -c_m(t) \langle m(t) | \frac{d}{dt} m(t) \rangle - \sum_{n \neq m} c_n(t) \frac{\langle m | \left( \frac{d}{dt} \hat{H} \right) | n \rangle}{E_n(t) - E_m(t)} e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))}. \quad (2.8)$$

L'approximation adiabatique consiste à supposer que  $d\hat{H}/dt$  est suffisamment petit de manière à pouvoir négliger le second terme de l'équation (2.8). Nous pouvons comprendre cette approximation de la manière suivante [16] : d'après l'équation (2.7), nous avons

$$\frac{\langle m(t) | \left( \frac{d}{dt} \hat{H} \right) | n(t) \rangle}{(E_n - E_m)} = \langle m(t) | \frac{d}{dt} n(t) \rangle. \quad (2.9)$$

Le membre de droite de cette équation correspond à la composante dans la direction  $|m\rangle$  du taux de variation du  $n^e$  vecteur propre de  $\hat{H}$ ,  $|n(t)\rangle$ . Dans l'approximation adiabatique, nous supposons que l'hamiltonien varie lentement au cours du temps, ce qui se traduit par le fait que le taux de variation des vecteurs propres de  $\hat{H}$  est lui aussi faible. Dès lors, il semble assez naturel qu'un système dans un état propre de  $\hat{H}$  reste dans cet état propre au cours du temps. Plus précisément, la solution de l'équation (2.8) dans l'approximation adiabatique est donnée par

$$c_m(t) = c_m(0) e^{i\gamma_m(t)} \quad (2.10)$$

avec

$$\gamma_m(t) = i \int_0^t \langle m(t') | \frac{d}{dt'} m(t') \rangle dt'. \quad (2.11)$$

Remarquons que  $\gamma_m(t)$  est strictement réel<sup>1</sup>. Si le système est initialement dans l'état propre  $|n(t=0)\rangle$  de  $\hat{H}(t=0)$ , nous avons  $c_n(0) = 1$  et  $c_m(0) = 0$  pour tout  $m \neq n$ . Donc, en vertu de l'équation (2.4), nous avons

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} |n(t)\rangle. \quad (2.12)$$

Le système reste à tout instant dans le  $n^e$  état propre de  $H(t)$  à un facteur de phase près.

## 2.2 La phase de Berry

Avant de s'intéresser plus amplement au processus adiabatique, il est utile de définir ce qu'est un système non-holonomique. Un système qui, après avoir été transporté le long d'une boucle fermée, ne retourne pas à son état original est dit non-holonomique [15]. La notion de transport le long d'une boucle fermée ne désigne pas nécessairement un déplacement spatial mais tout changement dans les paramètres du système pour autant que ceux-ci retournent à leur valeur d'origine au final.

Étudions à présent les processus non-holonomiques adiabatiques dans le cadre de la mécanique quantique. Comme nous l'avons vu précédemment, un système initialement dans un état propre  $|n(0)\rangle$  de l'hamiltonien  $\hat{H}(t)$  évolue selon

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} |n(t)\rangle \quad (2.13)$$

avec  $\theta_n(t)$  la phase dynamique donnée par l'équation (2.5) (généralisant pour un hamiltonien dépendant du temps le facteur  $\exp(-iE_n t/\hbar)$ ) et  $\gamma_n(t)$  la phase géométrique ou phase de Berry donnée par l'équation (2.11). Si l'hamiltonien dépend du temps au travers de la variation temporelle de plusieurs paramètres  $R_i(t)$  ( $i = 1, \dots, N$ ), il existe un espace où les  $R_i(t)$  sont les composantes d'un vecteur  $\mathbf{R}(t)$  qui spécifie l'évolution temporelle de  $\hat{H}(t)$  [13]. Nous pouvons donc écrire  $E_n(t) = E_n(\mathbf{R}(t))$ ,  $|n(t)\rangle = |n(\mathbf{R}(t))\rangle$  et

$$\frac{d}{dt}|n(t)\rangle = \nabla_{\mathbf{R}}|n(\mathbf{R}(t))\rangle \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt} \quad (2.14)$$

où  $\nabla_{\mathbf{R}} = (\frac{\partial}{\partial R_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial R_N})$ . Le facteur de phase géométrique peut donc s'écrire sous la forme [13]

$$\begin{aligned} \gamma_n(t) &= i \int_0^t \langle n(t') | \nabla_{\mathbf{R}} | n(t') \rangle \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt'} dt' \\ &= i \int_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(t)} \langle n | \nabla_{\mathbf{R}} | n \rangle \cdot d\mathbf{R}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Si le mouvement dans l'espace des paramètres est périodique, c'est-à-dire si  $\mathbf{R}(t_f) = \mathbf{R}(0)$ , le vecteur  $\mathbf{R}(t)$  trace une courbe fermée dans cet espace et la phase géométrique devient

$$\gamma_n(t) = i \oint \langle n | \nabla_{\mathbf{R}} | n \rangle \cdot d\mathbf{R}. \quad (2.16)$$

La phase géométrique est donc donnée par une intégrale curviligne le long d'une boucle fermée dans l'espace des paramètres qui, en général, n'est pas nulle. Le nom de phase géométrique prend ici tout son sens car  $\gamma_n(t)$  ne dépend que du chemin suivi dans l'espace des paramètres et pas de la vitesse à laquelle ce chemin est parcouru [15].

Il est possible, pour un espace des paramètres à trois dimensions, de réécrire le facteur de phase  $\gamma_n(t)$  d'une manière plus commode<sup>2</sup> [13]. En posant

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \equiv i \langle n | \nabla_{\mathbf{R}} | n \rangle \quad (2.17)$$

1. En effet, vu que les états  $|m(t)\rangle$  sont normés, nous avons  $0 = \frac{d}{dt} \langle m | m \rangle = \langle m | \frac{d}{dt} m \rangle + \langle \frac{d}{dt} m | m \rangle = 2\Re(\langle m | \frac{d}{dt} m \rangle)$ . Dès lors, l'intégrand dans l'expression de  $\gamma_m$  est purement imaginaire et  $\gamma_m$  est réel

2. Il est possible de généraliser ce résultat pour un nombre plus grand de paramètres [17].

et en utilisant le théorème de Stokes, nous obtenons

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = \int_S (\nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R})) \cdot d\mathbf{a} \quad (2.18)$$

où  $d\mathbf{a}$  est un élément de la surface  $S$  délimitée par le contour  $\mathcal{C}$  et où  $\mathcal{C}$  est la courbe fermée tracée par le vecteur  $\mathbf{R}$  au cours d'un cycle dans l'espace des paramètres. Nous pouvons donc voir la phase géométrique comme le flux au travers de la surface  $S$  du champ magnétique fictif

$$\mathbf{B}_n = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}). \quad (2.19)$$

Remarquons que le facteur de phase géométrique ne dépend que de ce flux indépendamment du parcours de  $\mathbf{R}(t)$  dans l'espace des paramètres. De plus,  $\mathbf{A}_n$  et  $\mathbf{B}_n$  sont des quantités strictement réelles [13]. Une autre propriété intéressante de cette manière de voir le facteur de phase est la suivante : supposons que l'état du système soit multiplié par un facteur de phase variable dans l'espace des paramètres,

$$|n(t)\rangle \rightarrow e^{i\delta(\mathbf{R})}|n(t)\rangle \quad (2.20)$$

À partir de (2.17), nous avons

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \rightarrow \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \nabla_{\mathbf{R}}\delta(\mathbf{R}). \quad (2.21)$$

Cette transformation de  $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$  laisse invariante l'intégrale de flux (2.18), ce qui signifie que le facteur de phase géométrique  $\gamma_n$  ne dépend pas du détail de l'évolution de la phase le long du chemin  $\mathcal{C}$  dans l'espace des paramètres mais seulement de la géométrie de ce chemin [13]. De plus, notons que les transformations (2.20) et (2.21) ont exactement la même forme que les transformations de jauge en électromagnétisme.

Évaluons de manière plus explicite la phase géométrique [13]. En injectant (2.17) dans l'expression (2.19) du champ magnétique fictif  $\mathbf{B}_n$  et comme le rotationnel d'un gradient s'annule, nous obtenons

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{R}) = i(\nabla_{\mathbf{R}}\langle n| \times \nabla_{\mathbf{R}}|n\rangle). \quad (2.22)$$

En insérant dans cette expression la relation de fermeture

$$\hat{\mathbf{1}} = \sum_m |m(t)\rangle\langle m(t)|, \quad (2.23)$$

en remarquant que la normalisation des états  $|n(t)\rangle$  implique [13]

$$\Re\langle n(t)|\nabla_{\mathbf{R}}|n(t)\rangle = \mathbf{0}, \quad (2.24)$$

et en utilisant les résultats (2.9) et (2.14), nous obtenons

$$\begin{aligned} \gamma_n(\mathcal{C}) &= \int_S \mathbf{B}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{a} \\ \mathbf{B}_n(\mathbf{R}) &= i \sum_{m \neq n} \frac{\langle n|\nabla_{\mathbf{R}}\hat{H}|m\rangle \times \langle m|\nabla_{\mathbf{R}}\hat{H}|n\rangle}{(E_m - E_n)^2}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Ce résultat montre que les points dans l'espace des paramètres où les niveaux d'énergie sont dégénérés ( $E_m(\mathbf{R}) = E_n(\mathbf{R})$ ) contribuent à la phase géométrique via le flux du champ  $\mathbf{B}_n$  au travers de la surface  $S$  même si le chemin qui soutient cette surface ne passe pas par ces points [13]. Une autre manière de voir ce résultat consiste à dire que la présence de dégénérescence conduit à une valeur infinie du champ  $\mathbf{B}_n$  ce qui est interprété comme la présence de sources de ce champ. La phase de Berry est donc le flux associé à de telles sources [18].

## 2.3 Exemples

Calculons, à titre d'exemple, la phase géométrique dans le cas d'une particule de spin  $\frac{1}{2}$  et de moment magnétique  $\boldsymbol{\mu}$  plongée dans un champ magnétique  $\mathbf{R}(t)$ <sup>3</sup> variable au cours du temps. L'hamiltonien du système est donné par [13]

$$\hat{H}(t) = \hat{H}(\mathbf{R}(t)) = -\frac{2\mu}{\hbar} \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{R}(t), \quad (2.26)$$

où  $\hat{\mathbf{S}}$  est l'opérateur de moment cinétique de la particule de spin  $\frac{1}{2}$ . En prenant la direction  $\mathbf{e}_z$  dans la même direction que  $\mathbf{R}(t)$ , les deux valeurs propres de l'hamiltonien relatives aux états spin up et down ( $|\pm(t)\rangle$ ) sont données par

$$E_{\pm}(t) = \mp \mu R(t) \quad (2.27)$$

avec  $R(t) = |\mathbf{R}(t)|$  l'amplitude du champ magnétique. Nous pouvons procéder au calcul de  $\mathbf{B}$  au moyen de la formule (2.25). Comme le système ne comporte que deux états propres, la somme se ramène à un seul terme. Le dénominateur vaut

$$(E_{\pm} - E_{\mp})^2 = 4\mu^2 R^2. \quad (2.28)$$

Par ailleurs, nous avons

$$\nabla_{\mathbf{R}} \hat{H} = -\frac{2\mu}{\hbar} \hat{\mathbf{S}}. \quad (2.29)$$

Le produit vectoriel dans (2.25) donne

$$\langle \pm(t) | \hat{\mathbf{S}} | \mp(t) \rangle \times \langle \mp(t) | \hat{\mathbf{S}} | \pm(t) \rangle = \langle \pm(t) | \hat{\mathbf{S}} | \mp(t) \rangle \times \langle \pm(t) | \hat{\mathbf{S}} | \mp(t) \rangle^* \quad (2.30)$$

La direction du champ magnétique  $\mathbf{R}$  définit la direction  $\mathbf{e}_z$ , et les états propres  $|\pm(t)\rangle$  sont aussi états propres de l'opérateur  $\hat{S}_z$ . Nous pouvons écrire [13]

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)\mathbf{e}_x + \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-)\mathbf{e}_y + \hat{S}_z\mathbf{e}_z \quad (2.31)$$

avec  $\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm \hat{S}_y$  et  $\hat{S}_{\pm}|\mp\rangle = \hbar|\pm\rangle$  et  $\hat{S}_{\pm}|\pm\rangle = 0$ . Nous obtenons ainsi

$$\langle \pm | \hat{\mathbf{S}} | \mp \rangle = \frac{\hbar}{2}(\mathbf{e}_x \mp i\mathbf{e}_y) \quad (2.32)$$

et par conséquent

$$\mathbf{B}_{\pm}(\mathbf{r}) = \mp \frac{1}{2R^2(t)}\mathbf{e}_z = \mp \frac{1}{2R^2(t)} \frac{\mathbf{R}}{R}. \quad (2.33)$$

Au final, la phase de Berry vaut [13]

$$\gamma_{\pm} = \mp \frac{1}{2} \int_S \frac{\mathbf{R} \cdot d\mathbf{a}}{R^3} = \mp \frac{1}{2} \Omega \quad (2.34)$$

avec  $\Omega$  l'angle solide sous-tendu par le chemin emprunté par le vecteur  $\mathbf{R}(t)$  par rapport à l'origine  $\mathbf{R} = 0$  dans l'espace des paramètres. L'origine  $\mathbf{R} = 0$  correspond à des niveaux  $E_{\pm}$  dégénérés et donc à une source ponctuelle de champ  $\mathbf{B}$ . Ce résultat met en évidence le caractère géométrique de la phase de Berry : elle ne dépend pas du chemin précis parcouru dans l'espace des paramètres mais uniquement de l'angle solide sous-tendu par ce chemin.

Bien que l'habitude veuille qu'en mécanique quantique la phase globale des fonctions d'onde soit considérée comme arbitraire car elle ne modifie pas les résultats du calcul de quantités physiques, la

---

3. Nous utilisons la notation  $\mathbf{R}(t)$  pour le champ magnétique dans ce contexte pour rappeler qu'il s'agit du paramètre variable au cours du temps et afin d'éviter toute confusion avec le vecteur  $\mathbf{B}$  qui intervient dans le calcul de la phase de Berry.

phase relative entre la fonction d'onde d'un système avant et après une boucle fermée dans l'espace des paramètres n'est pas arbitraire et peut être mesurée au moyen d'expériences d'interférences. Afin d'illustrer notre propos, considérons l'expérience suivante [15, 17, 18] : un faisceau de particules de spin  $1/2$  polarisé dans un état de spin haut le long d'un champ magnétique  $\mathbf{R}$  est divisé en deux parties. L'une des deux parties du faisceau original reste plongée dans un champ magnétique constant alors que l'autre partie du faisceau est soumise à un champ magnétique dont l'amplitude est constante mais dont la direction parcourt une courbe fermée  $\mathcal{C}$  soutenant un angle solide  $\Omega$  suffisamment lentement pour que le théorème adiabatique soit applicable. Le facteur de phase géométrique supplémentaire apparaissant pour les particules soumises à un champ magnétique variable est donné par l'expression (2.34). Remarquons que le facteur de phase dynamique (2.5) est identique pour les deux parties du faisceau car les énergies propres (2.27) ne dépendent que de l'amplitude du champ magnétique. Les deux parties du faisceau de particules sont ensuite recombinaées et un détecteur nous permet de mesurer l'intensité du faisceau recombinaé en fonction de l'angle solide  $\Omega$ . Le spectre ainsi obtenu présente des franges d'interférence dues à la phase de Berry et permet une mesure de celle-ci. Notons également que le concept de phase de Berry est particulièrement bien adapté à la description de l'effet Bohm-Aharonov [15, 17].

Il est possible de préciser le sens physique du "potentiel vecteur"  $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$  si les paramètres  $R_i(t)$  sont eux-mêmes quantifiés [18, 19]. Considérons l'hamiltonien d'une molécule diatomique

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \hat{H}_e(\hat{\mathbf{R}}) \quad (2.35)$$

où  $\hat{\mathbf{R}}$  est l'opérateur associé à la position des noyaux et est pris sous la forme d'un vecteur à six dimensions,  $\hat{\mathbf{P}} = \hbar \nabla_{\mathbf{R}}/i$  est l'opérateur impulsion canoniquement conjugué à la position des noyaux  $\hat{\mathbf{R}}$  et où  $\hat{H}_e(\hat{\mathbf{R}})$  est l'hamiltonien décrivant la dynamique des électrons et dépend de la position des noyaux. L'hamiltonien électronique possède comme états propres les états  $|n(\mathbf{R})\rangle$  de valeurs propres  $E_n(\mathbf{R})$  avec la relation d'orthonormalisation  $\langle m(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle = \delta_{mn}$ . Supposons que le système se trouve initialement dans un état propre électronique  $|n(\mathbf{R})\rangle$  et que l'hamiltonien  $\hat{H}_e(\hat{\mathbf{R}})$  varie suffisamment lentement avec le mouvement des noyaux pour que le théorème adiabatique soit applicable, le système reste dans l'état électronique  $|n(\mathbf{R})\rangle$  et nous pouvons alors écrire l'état global du système sous la forme

$$\langle \mathbf{R}|\psi_{\text{tot}}(\mathbf{R})\rangle = \chi(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle. \quad (2.36)$$

où  $\chi(\mathbf{R})$  est une fonction d'onde décrivant le mouvement des noyaux. En calculant  $\hat{H}_{\text{tot}}|\psi(\mathbf{R})\rangle$  et en projetant sur l'état propre interne  $|n(\mathbf{R})\rangle$ , nous trouvons que la fonction  $\chi(\mathbf{R})$  obéit à une équation de Schrödinger avec l'hamiltonien effectif [18]

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \frac{(\hat{\mathbf{P}} - \hat{\mathbf{A}})^2}{2M} + U(\hat{\mathbf{R}}) \quad (2.37)$$

où  $\hat{\mathbf{A}}$  est donné par (2.17) et

$$U(\hat{\mathbf{R}}) = E_n(\hat{\mathbf{R}}) - \frac{\langle n(\mathbf{R})|\nabla_{\hat{\mathbf{R}}}^2 n(\mathbf{R})\rangle}{2M} + \hat{\mathbf{A}}_n^2(\mathbf{R}). \quad (2.38)$$

Ce résultat correspond à l'approximation de Born-Oppenheimer. Il est possible de généraliser ce résultat pour différents types de systèmes contenant à la fois des degrés de liberté rapides, qui joueront le même rôle que l'hamiltonien électronique, et lents  $(\mathbf{R}, \mathbf{P})$ . Le système rapide influence la dynamique du système lent au travers du potentiel vecteur  $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{R})$  et du potentiel scalaire  $\hat{U}(\mathbf{R})$  [18].

## Chapitre 3

# Approche semi-classique de l'interaction atome-lumière

Dans ce chapitre, nous présentons l'approche semi-classique de l'interaction d'atomes avec des champs lasers. Dans cette approche, les atomes sont traités de manière quantique tandis que la lumière est assimilée à une onde électromagnétique classique. La section 3.1 est consacrée à l'établissement de l'hamiltonien décrivant l'interaction entre atomes et lumière dans le cadre de l'approximation dipolaire électrique. Dans les sections 3.2 et 3.3, nous particularisons les résultats obtenus précédemment aux cas d'atomes modélisés par des systèmes à deux et trois niveaux.

### 3.1 Hamiltonien d'un atome plongé dans des champs lasers

#### 3.1.1 Passage au référentiel du centre de masse

Notre point de départ est l'hamiltonien décrivant un atome en interaction avec une onde électromagnétique [20]

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} (\hat{\mathbf{p}} - q_{\alpha} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}_{\alpha}, t))^2 + V_{\text{Coul}}(\hat{\mathbf{r}}_{\alpha}) + q_{\alpha} \phi(\hat{\mathbf{r}}_{\alpha}, t) \quad (3.1)$$

avec  $\phi$  et  $\mathbf{A}$  les potentiels scalaire et vecteur associés à l'onde électromagnétique dans laquelle est plongé l'atome,  $\{q_{\alpha}\}$  les charges des particules constitutives de l'atome,  $V_{\text{Coul}}$  le potentiel électrostatique liant les électrons au noyau et où  $\hat{\mathbf{r}}_{\alpha}$  (resp.  $\hat{\mathbf{p}}_{\alpha}$ ) est l'opérateur position (resp. impulsion canonique) du noyau ( $\alpha = N$ ) ou des  $n$  électrons ( $\alpha = ei$ ). Il est utile, afin de simplifier la description d'atomes plongés dans des ondes électromagnétiques, de séparer le mouvement global de l'atome de sa dynamique interne. Dans ce but, nous remplaçons les opérateurs  $\hat{\mathbf{r}}_N$  et  $\hat{\mathbf{r}}_{ei}$  par les coordonnées relatives  $\hat{\mathbf{R}}_G$  et  $\hat{\mathbf{r}}_i$  avec [20]

$$\hat{\mathbf{r}}_i = \hat{\mathbf{r}}_{ei} - \hat{\mathbf{r}}_N \quad (3.2)$$

la position des électrons par rapport au noyau et

$$\hat{\mathbf{R}}_G = \frac{\sum_{i=1}^n m \hat{\mathbf{r}}_{ei} + m_N \hat{\mathbf{r}}_N}{M} \quad (3.3)$$

la position du centre de masse où  $m$  est la masse de l'électron,  $m_N$  la masse du noyau et  $M$  la masse totale de l'atome. En coordonnées relatives, l'hamiltonien peut se réécrire comme la somme d'un hamiltonien décrivant le mouvement du centre de masse et d'un hamiltonien spécifiant la dynamique interne [20] et il est possible de trouver des états propres du système atomique de la forme de produit d'une fonction d'onde décrivant le mouvement du centre de masse et d'une fonction décrivant la

dynamique interne. Comme les transitions que nous considérerons par la suite ne font intervenir qu'un seul électron par atome, nous considérons l'hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t))^2 + V_{\text{Coul}}(\hat{\mathbf{r}}) + e\phi(\hat{\mathbf{r}}, t) \quad (3.4)$$

avec  $\hat{\mathbf{r}}$  l'opérateur position de l'électron par rapport au noyau situé en  $\mathbf{r}_N$  et  $e < 0$  la charge de l'électron. Cet hamiltonien décrit un électron lié au noyau par le potentiel  $V_{\text{Coul}}(\mathbf{r})$  et plongé dans une onde électromagnétique [9].

Comme nous l'avons vu au chapitre 1, l'équation de Schrödinger est invariante en forme sous l'effet d'une transformation de jauge et nous disposons d'une certaine liberté dans le choix des potentiels scalaire et vecteur. Dans la suite, nous nous placerons dans la jauge de radiation [9], définie par

$$\phi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \text{et} \quad \nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.5)$$

### 3.1.2 Approximation dipolaire électrique

L'hamiltonien atomique peut être simplifié au moyen de l'approximation dipolaire électrique. Supposons que l'onde électromagnétique dans laquelle l'atome est plongé est une onde plane monochromatique de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  décrite par le potentiel vecteur  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ . Le potentiel vecteur ressenti par les électrons est donné par  $\mathbf{A}(\mathbf{r}_{ei}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}_N + \mathbf{r}_i, t)$ ,  $i = 1, \dots, N$  où les  $\mathbf{r}_i$  représentent les positions des électrons par rapport au noyau. L'approximation dipolaire électrique consiste à supposer que  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i \ll 1$ , ce qui entraîne [9]

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}_N + \mathbf{r}_i, t) &= \mathbf{A}(t) \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_N + \mathbf{r}_i)) \\ &\approx \mathbf{A}(t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_N). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Comme la distance entre les électrons et le noyau est de l'ordre de  $10^{-10}$  m et  $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$  avec  $\lambda$  la longueur d'onde de l'onde électromagnétique considérée, l'approximation dipolaire est valable pour des longueurs d'onde  $\lambda \gg 1$  nm, en particulier dans les domaines optique, infrarouge et micro-ondes. Dans l'approximation dipolaire électrique et dans la jauge de radiation, l'hamiltonien (3.4) prend la forme

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}_N, t))^2 + V_{\text{Coul}}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (3.7)$$

et l'équation de Schrödinger associée est donnée, en représentation des coordonnées, par

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \nabla - \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}_N, t) \right)^2 + V_{\text{Coul}}(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t). \quad (3.8)$$

Afin de simplifier cette équation, deux solutions équivalentes s'offrent à nous. Nous pouvons, au choix, effectuer une transformation de jauge (1.21) en choisissant (jauge de Göppert-Mayer)

$$\chi(\mathbf{r}, t) = -\frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}_N, t) \cdot \mathbf{r} \quad (3.9)$$

ou bien définir une nouvelle fonction d'onde  $\phi(\mathbf{r}, t)$  telle que [9]

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{ie\mathbf{A}(\mathbf{r}_N, t) \cdot \mathbf{r} / \hbar} \phi(\mathbf{r}, t). \quad (3.10)$$

En insérant cette expression pour la fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r}, t)$  dans l'équation de Schrödinger (3.8), nous obtenons

$$\begin{aligned} i\hbar \left[ \frac{ie}{\hbar} \dot{\mathbf{A}} \cdot \mathbf{r} \phi(\mathbf{r}, t) + \dot{\phi}(\mathbf{r}, t) \right] e^{ie\mathbf{A}(\mathbf{r}_N, t) \cdot \mathbf{r} / \hbar} &= e^{ie\mathbf{A}(\mathbf{r}_N, t) \cdot \mathbf{r} / \hbar} \left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V_{\text{Coul}}(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{r}, t) \\ \Leftrightarrow i\hbar \dot{\phi}(\mathbf{r}, t) &= \left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V_{\text{Coul}}(\mathbf{r}) - e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_N, t) \right] \phi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (3.11)$$

en utilisant la notation  $\dot{\phi} = \partial\phi/\partial t$  et le fait que le champ électrique  $\mathbf{E}(\mathbf{r}_N, t) = -\dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_N, t)$  en jauge de radiation. De manière compacte, l'hamiltonien s'écrit [9]

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (3.12)$$

avec

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V_{\text{Coul}}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (3.13)$$

$$\hat{H}_1 = -e\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_N, t). \quad (3.14)$$

L'hamiltonien  $\hat{H}_0$  correspond à l'hamiltonien du système en l'absence d'onde électromagnétique. Ses énergies et états propres,  $E_i$  et  $|i\rangle$ , correspondent aux niveaux d'énergie de l'atome considéré et sont supposés connus. L'hamiltonien  $\hat{H}_1$  décrit l'interaction entre le champ électromagnétique et l'atome. Cette interaction s'exprime en toute généralité comme  $-\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}$  avec  $\hat{\mathbf{d}} = e \sum_i \hat{\mathbf{r}}_i \equiv e\hat{\mathbf{r}}$  l'opérateur moment dipolaire électrique de l'atome et  $\mathbf{E}$  le champ électrique qui est une grandeur indépendante du choix de jauge.

Remarquons que l'élément de matrice  $\langle a|\hat{\mathbf{d}}|b\rangle$  de l'opérateur moment dipolaire a la propriété d'être nul lorsque les états atomiques  $|a\rangle$  et  $|b\rangle$  sont de même parité<sup>1</sup>. En effet, pour deux états propres  $|a\rangle$  et  $|b\rangle$  de  $\hat{H}$ , nous avons

$$\begin{aligned} \langle a|\hat{\mathbf{d}}|b\rangle &= e\langle a|\hat{\mathbf{1}}\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{1}}|b\rangle \\ &= e\langle a|\hat{P}^2\hat{\mathbf{r}}\hat{P}^2|b\rangle \\ &= -e\langle a|\hat{P}^\dagger\hat{\mathbf{r}}\hat{P}|b\rangle \\ &= -\langle a|\hat{P}^\dagger\hat{\mathbf{d}}\hat{P}|b\rangle. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Lorsque  $|a\rangle$  et  $|b\rangle$  sont de même parité, nous avons  $\langle a|\hat{\mathbf{d}}|b\rangle = -\langle a|\hat{\mathbf{d}}|b\rangle$ , soit  $\langle a|\hat{\mathbf{d}}|b\rangle = 0$ . En particulier,  $\langle i|\hat{\mathbf{d}}|i\rangle$  est nul pour tout état propre atomique  $|i\rangle$ .

### 3.1.3 Schéma d'interaction

Avant de nous intéresser à des systèmes plus spécifiques, il est utile d'introduire la notion de schéma d'interaction [9]. Partons de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (3.16)$$

où  $\hat{H}$  est l'hamiltonien du système. De manière formelle, résoudre cette équation est équivalent à trouver l'opérateur unitaire  $\hat{U}(t)$  tel que

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle \quad (3.17)$$

et satisfaisant

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{U}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t) \\ \hat{U}(0) &= \hat{\mathbf{1}}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Pour un hamiltonien de la forme (3.12) où  $\hat{H}_1$  décrit l'interaction du système avec des champs extérieurs, le schéma d'interaction consiste à assigner à la fonction d'onde uniquement la dépendance temporelle provenant de l'hamiltonien d'interaction. Dans ce but, nous définissons une nouvelle fonction d'onde [9]

$$|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}_0^\dagger(t) |\psi(t)\rangle \quad (3.19)$$

---

1. Pour rappel, l'opérateur parité  $\hat{P}$  transforme le vecteur  $\mathbf{r}$  en  $-\mathbf{r}$ . Comme  $\hat{P}^2 = \hat{\mathbf{1}}$ , l'opérateur parité admet  $\pm 1$  comme valeurs propres. L'opérateur  $\hat{P}$  commute avec l'hamiltonien du système et il existe une base d'états propres communs de  $\hat{P}$  et  $\hat{H}$ .

avec l'opérateur unitaire

$$\hat{U}_0(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right). \quad (3.20)$$

En injectant l'expression de  $|\psi\rangle$  en fonction de  $|\psi_I\rangle$  dans l'équation (3.16), nous obtenons

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi_I(t)\rangle = \hat{H}_I(t)|\psi_I(t)\rangle \quad (3.21)$$

avec

$$\hat{H}_I(t) = \hat{U}_0^\dagger(t)\hat{H}_1\hat{U}_0(t). \quad (3.22)$$

De manière générale, un opérateur  $\hat{O}$  quelconque devient en schéma d'interaction

$$\hat{O}_I(t) = \hat{U}_0^\dagger(t)\hat{O}_1\hat{U}_0(t). \quad (3.23)$$

Notons que la valeur moyenne d'un opérateur  $\hat{O}$  reste inchangée en schéma d'interaction. En effet, en utilisant l'expression pour la valeur moyenne d'un opérateur et l'équation (3.19), il vient

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle &= \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi_I | \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{O} \hat{U}_0(t) | \psi_I \rangle \\ &= \langle \psi_I | \hat{O}_I | \psi_I \rangle. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Il est possible de généraliser la transformation unitaire définissant le schéma d'interaction [21]. Nous pouvons définir une nouvelle fonction d'onde

$$|\psi_A\rangle = \hat{U}^\dagger |\psi\rangle \quad (3.25)$$

avec

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{A}t\right). \quad (3.26)$$

où  $\hat{A}$  est un opérateur hermitique. Cette transformation revient à se placer dans un référentiel en rotation dans l'espace d'Hilbert. L'hamiltonien résultant de cette transformation s'obtient en insérant l'expression de  $|\psi\rangle$  en fonction de  $|\psi_A\rangle$  dans l'équation (3.16). Au final, nous obtenons

$$\hat{H}_A = \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} - \hat{A}. \quad (3.27)$$

## 3.2 Atomes à deux niveaux

Étudions à présent la dynamique d'un atome assimilé à un système à deux niveaux d'énergie et plongé dans une onde électromagnétique. L'hamiltonien d'un tel système est donné par les équations (3.12), (3.13) et (3.14). Comme nous considérons un système à deux niveaux, l'hamiltonien en l'absence de champ électromagnétique,  $\hat{H}_0$ , admet comme base d'états propres  $\{|e\rangle, |g\rangle\}$ ,

$$\hat{H}_0|e\rangle = E_e|e\rangle, \quad \hat{H}_0|g\rangle = E_g|g\rangle \quad (3.28)$$

où  $E_e$  (resp.  $E_g$ ) est l'énergie propre associée à l'état  $|e\rangle$  (resp.  $|g\rangle$ ). Nous choisirons par convention  $E_e > E_g$ . Les niveaux d'énergie d'un atome à deux niveaux sont représentés sur la figure 3.1. En utilisant la relation de fermeture

$$\hat{1} = |e\rangle\langle e| + |g\rangle\langle g| \quad (3.29)$$

avec  $|e\rangle\langle e|$  et  $|g\rangle\langle g|$  les projecteurs sur les états  $|e\rangle$  et  $|g\rangle$ , nous pouvons réécrire  $\hat{H}_0$  sous la forme [9]

$$\hat{H}_0 = E_e|e\rangle\langle e| + E_g|g\rangle\langle g|. \quad (3.30)$$

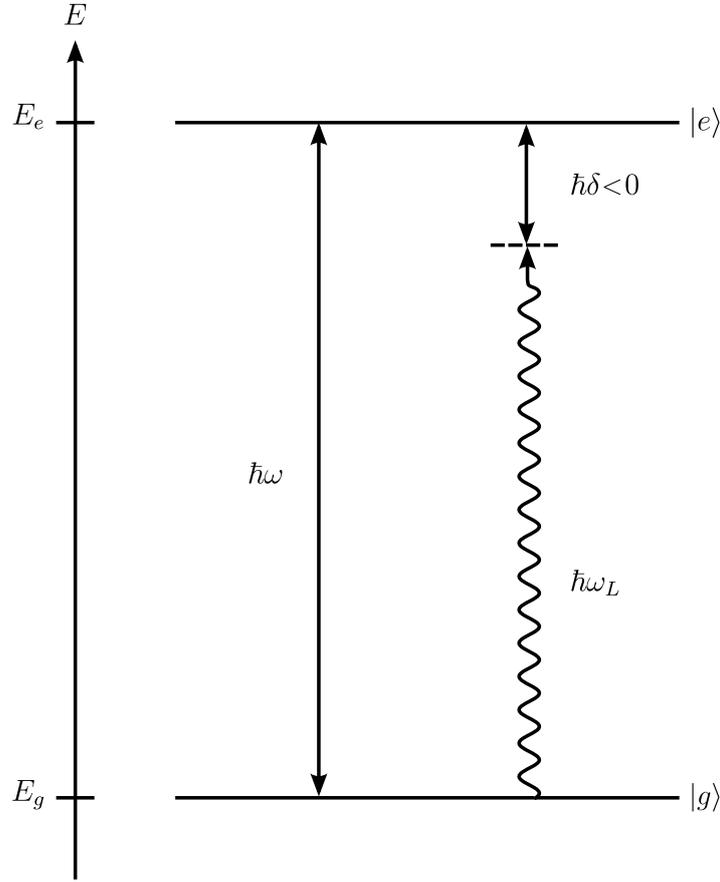


FIGURE 3.1 – Structure des niveaux d'énergie d'un système à deux niveaux.

Considérons maintenant l'hamiltonien  $\hat{H}_1$  décrivant l'interaction entre l'atome et l'onde électromagnétique. Soit une onde électromagnétique plane de pulsation  $\omega_L$  et de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_L$  polarisée dans une direction  $\boldsymbol{\epsilon}$ . Typiquement, il s'agit d'un faisceau lumineux produit par un laser. Le champ électrique associé à cette onde est de la forme

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}_0 \boldsymbol{\epsilon} \cos(\omega_L t - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}) \quad (3.31)$$

où  $\mathcal{E}_0$  est l'amplitude du champ électrique. L'hamiltonien  $\hat{H}_1$  donné par l'équation (3.14) fait intervenir le champ électrique en  $\mathbf{r}_N$ , la position du noyau de l'atome. Cet hamiltonien peut se réécrire en utilisant la relation de fermeture [9]

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= -e\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_N, t) \\ &= -e\hat{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \mathcal{E}_0 \cos(\omega_L t - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N) \\ &= -e (\langle e|\hat{\mathbf{r}}|g\rangle \cdot \boldsymbol{\epsilon} |e\rangle\langle g| + \langle g|\hat{\mathbf{r}}|e\rangle \cdot \boldsymbol{\epsilon} |g\rangle\langle e|) \mathcal{E}_0 \cos(\omega_L t - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N) \\ &= -(\mathbf{d}^* \cdot \boldsymbol{\epsilon} |e\rangle\langle g| + \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\epsilon} |g\rangle\langle e|) \mathcal{E}_0 \cos(\omega_L t - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N) \\ &= (\hbar\Omega |e\rangle\langle g| + \hbar\Omega^* |g\rangle\langle e|) \cos(\omega_L t - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N) \end{aligned} \quad (3.32)$$

avec

$$\Omega = -\frac{\mathbf{d}^* \cdot \boldsymbol{\epsilon} \mathcal{E}_0}{\hbar}, \quad \mathbf{d} = e\langle g|\hat{\mathbf{r}}|e\rangle \quad (3.33)$$

où  $\Omega$  la fréquence de Rabi qui caractérise l'intensité du couplage entre les niveaux  $|e\rangle$  et  $|g\rangle$ . Cet hamiltonien dépend explicitement du temps. Afin d'en simplifier l'expression, passons en schéma d'in-

teraction. En utilisant les équations (3.22) et (3.20) avec  $\hat{H}_0$  donné par (3.30), nous obtenons

$$\hat{H}_I = \frac{\hbar}{2} \hat{U}_0^\dagger (\Omega |e\rangle\langle g| + \Omega^* |g\rangle\langle e|) \hat{U}_0 \left( e^{i(\omega_L t - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N)} + e^{-i(\omega_L t - \mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N)} \right) \quad (3.34)$$

avec

$$\begin{aligned} \hat{U}_0 &= e^{-i(E_e |e\rangle\langle e| + E_g |g\rangle\langle g|)t/\hbar} \\ &= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{-it}{\hbar} \right)^n (E_e |e\rangle\langle e| + E_g |g\rangle\langle g|)^n \\ &= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{-it}{\hbar} \right)^n [(E_e)^n |e\rangle\langle e| + (E_g)^n |g\rangle\langle g|] \\ &= e^{-iE_g t/\hbar} |g\rangle\langle g| + e^{-iE_e t/\hbar} |e\rangle\langle e| \end{aligned} \quad (3.35)$$

où le passage de la deuxième ligne à la troisième ligne se fait en utilisant la propriété d'orthogonalité des projecteurs  $|g\rangle\langle g|$  et  $|e\rangle\langle e|$ . En posant  $\hbar\omega = E_e - E_g$  et  $\delta = \omega_L - \omega$ , nous obtenons

$$\hat{H}_I = \frac{\hbar}{2} \left[ \Omega e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N} \left( e^{-i\delta t} + e^{i(\omega + \omega_L)t} \right) |e\rangle\langle g| + h.c. \right] \quad (3.36)$$

où la notation *h.c.* signifie hermitique conjugué. Afin de simplifier cet hamiltonien, nous effectuons l'*approximation séculaire* qui revient à supprimer les termes oscillants à la fréquence  $\omega + \omega_L$  [9]. En effet, si  $\omega + \omega_L \gg \delta$ , les termes de l'hamiltonien contenant  $\exp(\pm i(\omega + \omega_L)t)$  oscillent très vite par rapport aux termes  $\exp(\pm i\delta t)$  et se moyennent à zéro sur un intervalle de temps  $\Delta t \gg 1/(\omega + \omega_L)$  mais petit par rapport au temps caractéristique d'évolution des populations  $\tau \approx 1/\Omega$ . Dans cette approximation, l'hamiltonien d'interaction s'écrit

$$\hat{H}_I = \frac{\hbar}{2} \left[ \Omega^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N} e^{i\delta t} |g\rangle\langle e| + \Omega e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N} e^{-i\delta t} |e\rangle\langle g| \right]. \quad (3.37)$$

Nous pouvons éliminer la dépendance temporelle de (3.37) en nous plaçant dans un référentiel en rotation. En utilisant les expressions (3.26) et (3.27) avec

$$\hat{A} = \frac{\hbar\delta}{2} (|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|) \quad (3.38)$$

et en calculant la transformation unitaire comme en (3.35), nous obtenons

$$\hat{H}_{2\text{niv}} = \frac{\hbar}{2} \left( \Omega^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N} |g\rangle\langle e| + \Omega e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N} |e\rangle\langle g| - \delta |e\rangle\langle e| + \delta |g\rangle\langle g| \right) \quad (3.39)$$

ou en notation matricielle dans la base des états non couplés  $\{|e\rangle, |g\rangle\}$

$$\hat{H}_{2\text{niv}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\delta & \Omega e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N} \\ \Omega^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N} & \delta \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

L'hamiltonien  $\hat{H}_{2\text{niv}}$  admet comme énergies propres  $E_\pm = \pm \frac{\hbar}{2} \sqrt{\delta^2 + |\Omega|^2}$  de vecteurs propres

$$|\chi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(\delta^2 + |\Omega|^2 \mp \delta\sqrt{\delta^2 + |\Omega|^2})}} \begin{pmatrix} e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N} \left( -\delta \pm \sqrt{\delta^2 + |\Omega|^2} \right) \\ \Omega^* \end{pmatrix}. \quad (3.41)$$

Il est possible de déterminer les énergies et états propres de  $\hat{H}_{2\text{niv}}$  d'une autre manière. Choisissons tout d'abord le système de référence de manière à imposer  $\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_N = 0$ . De plus, posons

$\Omega = |\Omega| \exp(i\alpha)$  et introduisons la fréquence de Rabi généralisée  $\Lambda = \sqrt{\delta^2 + |\Omega|^2}$ . Nous pouvons alors réécrire l'hamiltonien (3.40) sous la forme

$$\hat{H}_{2\text{niv}} = \frac{\hbar\Lambda}{2} \begin{pmatrix} \frac{-\delta}{\sqrt{\delta^2 + |\Omega|^2}} & \frac{|\Omega|e^{i\alpha}}{\sqrt{\delta^2 + |\Omega|^2}} \\ \frac{|\Omega|e^{-i\alpha}}{\sqrt{\delta^2 + |\Omega|^2}} & \frac{\delta}{\sqrt{\delta^2 + |\Omega|^2}} \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

Afin de déterminer les énergies et états propres de cet hamiltonien, posons

$$\cos \theta = \frac{\delta}{\sqrt{\delta^2 + |\Omega|^2}} \text{ et } \sin \theta = \frac{|\Omega|}{\sqrt{\delta^2 + |\Omega|^2}} \quad (3.43)$$

où  $\theta$  est l'angle de mélange. Nous avons

$$\hat{H}_{2\text{niv}} = \frac{\hbar\Lambda}{2} \begin{pmatrix} -\cos \theta & e^{i\alpha} \sin \theta \\ e^{-i\alpha} \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

où  $\theta$  est déterminé par la condition

$$\tan \theta = \frac{|\Omega|}{\delta}, \quad -\frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}. \quad (3.45)$$

Sous cette forme, il est aisé de vérifier que  $\hat{H}_{2\text{niv}}$  admet bien comme valeurs propres les énergies  $E_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} \sqrt{\delta^2 + |\Omega|^2} = \pm \hbar\Lambda/2$  de vecteurs propres [22]

$$|\chi_+\rangle = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \sin(\frac{\theta}{2}) \\ \cos(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix}, \quad |\chi_-\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) \\ -e^{-i\alpha} \sin(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix}. \quad (3.46)$$

Ces états sont appelés états habillés du fait qu'ils proviennent de l'interaction de l'atome avec la lumière. Ils forment une base orthonormée.

Un tel hamiltonien conduit à des oscillations, dites de Rabi, pour les populations des états  $|e\rangle$  et  $|g\rangle$  [9, 23]. En effet, comme les états  $|e\rangle$  et  $|g\rangle$  ne sont pas des états propres de  $\hat{H}_{2\text{niv}}$ , lorsque le système se trouve initialement dans un de ces deux états, il oscille au cours du temps entre les états  $|e\rangle$  et  $|g\rangle$  avec une probabilité de passer d'un état à l'autre [9, 23]

$$P_{g \rightarrow e} = \frac{|\Omega|^2}{|\Omega|^2 + \delta^2} \sin^2 \left( \frac{\Lambda t}{2} \right). \quad (3.47)$$

### 3.3 Atomes à trois niveaux

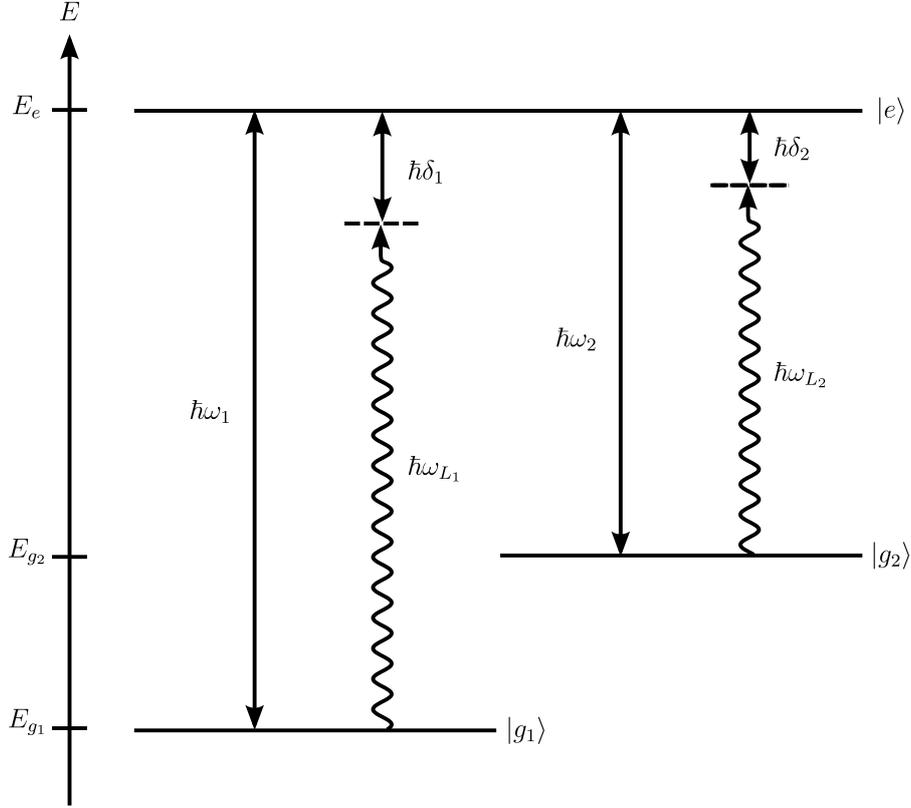
Intéressons-nous à présent à des systèmes atomiques à trois niveaux plongés dans deux champs lasers différents. Nous nous plaçons toujours dans l'approximation dipolaire électrique. Les niveaux d'énergie de l'atome sont en configuration  $\Lambda$ , c'est-à-dire deux niveaux  $|g_1\rangle$  et  $|g_2\rangle$  d'énergie proche et un niveau excité  $|e\rangle$  d'énergie plus élevée. La transition entre les niveaux  $|g_1\rangle$  et  $|g_2\rangle$  de même parité est interdite. Le laser 1 de fréquence  $\omega_{L_1}$  et de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_{L_1}$  excite la transition  $|g_1\rangle \leftrightarrow |e\rangle$ . Sa polarisation  $\boldsymbol{\epsilon}_1$  est choisie de façon à ne pas coupler les états  $|g_2\rangle$  et  $|e\rangle$  ( $\Omega_{g_2 \leftrightarrow e} = -\mathbf{d}_2^* \cdot \boldsymbol{\epsilon}_1 \mathcal{E}_0 / \hbar = 0$ ). Similairement, le laser 2 de fréquence  $\omega_{L_2}$  et de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_{L_2}$  agit uniquement sur la transition  $|g_2\rangle \leftrightarrow |e\rangle$ . Les niveaux d'énergie d'un tel système atomique sont représentés sur la figure 3.2.

L'hamiltonien du système peut s'écrire sous la forme

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (3.48)$$

avec  $\hat{H}_0$  et  $\hat{H}_1$  donnés respectivement par les équations (3.13) et (3.14) et

$$\hat{H}_0|g_1\rangle = E_{g_1}|g_1\rangle, \quad \hat{H}_0|g_2\rangle = E_{g_2}|g_2\rangle, \quad \hat{H}_0|e\rangle = E_e|e\rangle. \quad (3.49)$$

FIGURE 3.2 – Structure des niveaux d'énergie d'un système à trois niveaux en configuration  $\Lambda$ .

En appliquant le même raisonnement que pour l'atome à deux niveaux, il est possible de réécrire  $\hat{H}_0$  sous une forme analogue à l'équation (3.30),

$$\hat{H}_0 = E_e |e\rangle\langle e| + \sum_{i=1}^2 E_{g_i} |g_i\rangle\langle g_i|. \quad (3.50)$$

De même, en supposant que les ondes électromagnétiques donnent lieu à des champs électriques de la forme ( $i = 1, 2$ )

$$\mathbf{E}_i(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}_{0i} \boldsymbol{\epsilon}_i \cos(\omega_{L_i} t - \mathbf{k}_{L_i} \cdot \mathbf{r}), \quad (3.51)$$

l'hamiltonien  $\hat{H}_1$  peut s'exprimer sous la même forme que l'équation (3.32),

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^2 (\hbar\Omega_i |e\rangle\langle g_i| + \hbar\Omega_i^* |g_i\rangle\langle e|) \cos(\omega_{L_i} t) \quad (3.52)$$

avec

$$\Omega_i = -\frac{\mathbf{d}_i^* \cdot \boldsymbol{\epsilon}_i \mathcal{E}_{0i}}{\hbar} e^{i\mathbf{k}_{L_i} \cdot \mathbf{r}_N}, \quad \mathbf{d}_i = e \langle g_i | \hat{\mathbf{r}} | e \rangle. \quad (3.53)$$

Plaçons-nous maintenant en schéma d'interaction en utilisant la transformation donnée par (3.20) et (3.22). Le calcul de l'opérateur unitaire  $\hat{U}_0$  se fait de manière analogue au cas à deux niveaux. Après application de l'approximation séculaire, nous obtenons

$$\hat{H}_I = \sum_{i=1}^2 \frac{\hbar}{2} [\Omega_i^* e^{i\delta_i t} |g_i\rangle\langle e| + \Omega_i e^{-i\delta_i t} |e\rangle\langle g_i|] \quad (3.54)$$

avec  $\hbar\omega_i = E_e - E_{g_i}$  et  $\delta_i = \omega_{L_i} - \omega_i$ . La dépendance temporelle de  $\hat{H}_I$  peut être éliminée en se plaçant dans un référentiel tournant. Dans ce but, utilisons les équations (3.26) et (3.27) où nous choisissons

$$\hat{A} = \frac{\hbar}{2} [(\delta_1 + \delta_2)|e\rangle\langle e| - (\delta_1 - \delta_2)|g_1\rangle\langle g_1| + (\delta_1 - \delta_2)|g_2\rangle\langle g_2|]. \quad (3.55)$$

Nous obtenons donc un nouvel hamiltonien

$$\hat{H}_{3\text{niv}} = \frac{\hbar}{2} \left[ \sum_{i=1}^2 (\hbar\Omega_i^*|g_i\rangle\langle e| + \hbar\Omega_i|e\rangle\langle g_i|) \right] + \frac{\hbar}{2} [(\delta_1 - \delta_2)|g_1\rangle\langle g_1| - (\delta_1 + \delta_2)|e\rangle\langle e| - (\delta_1 - \delta_2)|g_2\rangle\langle g_2|] \quad (3.56)$$

que nous pouvons écrire sous forme matricielle dans la base des états non couplés  $\{|g_1\rangle, |e\rangle, |g_2\rangle\}$

$$\hat{H}_{3\text{niv}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \delta_1 - \delta_2 & \Omega_1^* & 0 \\ \Omega_1 & -(\delta_1 + \delta_2) & \Omega_2 \\ 0 & \Omega_2^* & -(\delta_1 - \delta_2) \end{pmatrix}. \quad (3.57)$$

Considérons le cas le plus simple où les désaccords en fréquence  $\delta_1$  et  $\delta_2$  sont nuls. En d'autres termes, nous considérons une transition Raman résonante entre les états  $|g_1\rangle$  et  $|g_2\rangle$  [22]. L'hamiltonien devient

$$\hat{H}_{3\text{niv}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Omega_1^* & 0 \\ \Omega_1 & 0 & \Omega_2 \\ 0 & \Omega_2^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.58)$$

et il est aisé de montrer qu'il admet comme énergies propres  $E_D = 0, E_{\pm} = \pm\hbar\Omega/2$  avec  $\Omega = \sqrt{|\Omega_1|^2 + |\Omega_2|^2}$ . L'état propre d'énergie nulle

$$|D\rangle = \frac{\Omega_2|g_1\rangle - \Omega_1|g_2\rangle}{\Omega} \quad (3.59)$$

est appelé état sombre ou état non couplé car il ne contient pas le niveau excité  $|e\rangle$  [22]. Les états propres relatifs aux énergies propres  $E_{\pm}$  sont de la forme

$$|\pm\rangle = \frac{|B\rangle \pm |e\rangle}{\sqrt{2}} \quad (3.60)$$

où

$$|B\rangle = \frac{\Omega_1^*|g_1\rangle + \Omega_2^*|g_2\rangle}{\Omega} \quad (3.61)$$

est appelé état brillant ou état couplé [22]. De tels états, et particulièrement les états sombres, sont utilisés dans les processus STIRAP<sup>2</sup> [24].

---

2. Stimulated Raman Adiabatic Passage



## Chapitre 4

# Méthodes d'obtention de champs de jauge artificiels

Dans ce chapitre, nous passons en revue différentes méthodes permettant de créer des champs de jauge artificiels. La simulation de champs de jauge est particulièrement intéressante car elle permet de reproduire dans le cadre hautement maîtrisé des atomes neutres ultrafroids divers phénomènes issus de la physique de l'état solide tel que l'effet Hall quantique [24]. Afin de générer un champ de jauge artificiel sur un système atomique, l'idée principale est d'en modifier l'hamiltonien par diverses méthodes afin que celui-ci prenne une forme similaire à l'hamiltonien d'une particule chargée plongée dans un champ de jauge et donné par l'équation (1.10). La manière la plus simple de modifier l'hamiltonien consiste à mettre les atomes en rotation et à se placer dans un référentiel tournant [25, 26]. Cette méthode est brièvement exposée dans la section 4.1. Une autre idée se base sur l'évolution adiabatique de l'état d'atomes plongés dans différents champs lasers [22, 27–33]. Ces méthodes, fondées sur l'interaction entre atomes et lumière, sont présentées à la section 4.2, et seront étendues au cas de systèmes à deux atomes dans les chapitres 5 et 7. Enfin, mentionnons que de nombreuses propositions théoriques ont été formulées pour générer des champs de jauge artificiels en utilisant des atomes piégés dans des réseaux optiques [22, 34, 35].

### 4.1 Pièges en rotation

Comme nous l'avons déjà évoqué, il est possible de créer un champ de jauge artificiel en se plaçant dans un référentiel en rotation. Cela est possible grâce aux similitudes entre l'expression de la force de Lorentz agissant sur une particule de charge  $q$  et de vitesse  $\mathbf{v}$  plongée dans un champ magnétique  $\mathbf{B}$

$$\mathbf{F}_{\text{Lorentz}} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}, \quad (4.1)$$

et celle de la force de Coriolis ressentie par une particule de masse  $m$  se mouvant à vitesse  $\mathbf{v}$  dans un référentiel tournant à vitesse angulaire  $\boldsymbol{\Omega}$

$$\mathbf{F}_{\text{Coriolis}} = 2m\mathbf{v} \times \boldsymbol{\Omega}. \quad (4.2)$$

Bien que d'origines complètement différentes, ces deux forces partagent la même structure et produisent donc des effets similaires sur une particule. Plus précisément, la dynamique d'une particule de charge  $q$  plongée dans un champ magnétique  $\mathbf{B}$  dans un référentiel fixe est identique à celle d'une particule de masse  $m$  en l'absence de champ magnétique dans un référentiel en rotation à vitesse angulaire  $\boldsymbol{\Omega} = q\mathbf{B}/(2m)$ .

En effet, considérons l'hamiltonien d'un atome neutre de masse  $m$  piégé dans un potentiel harmonique à symétrie cylindrique [26, 36]

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_{\perp}^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2) + \frac{1}{2}m\omega_{\parallel}^2\hat{z}^2 \quad (4.3)$$

avec  $\omega_{\perp}$  et  $\omega_{\parallel}$  les fréquences de piégeage dans le plan  $x - y$  et dans la direction  $\mathbf{e}_z$ , respectivement. Dans un référentiel en rotation à vitesse angulaire  $\boldsymbol{\Omega}$ , l'hamiltonien devient [37, 38]

$$\hat{H}_{\text{rot}} = \hat{H} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (4.4)$$

où  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$  est l'opérateur de moment cinétique de la particule. L'hamiltonien (4.3) dans un référentiel en rotation à vitesse angulaire  $\boldsymbol{\Omega} = \Omega \mathbf{e}_z$  prend donc la forme

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{rot}} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_{\perp}^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2) + \frac{1}{2}m\omega_{\parallel}^2\hat{z}^2 - \boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \\ &= \frac{(\hat{\mathbf{p}} - m\boldsymbol{\Omega} \times \hat{\mathbf{r}})^2}{2m} + \frac{1}{2}m(\omega_{\perp}^2 - \Omega^2)(\hat{x}^2 + \hat{y}^2) + \frac{1}{2}m\omega_{\parallel}^2\hat{z}^2 \end{aligned} \quad (4.5)$$

où nous nous sommes servis du fait que  $\boldsymbol{\Omega} \cdot (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}) = \hat{\mathbf{p}} \cdot (\boldsymbol{\Omega} \times \hat{\mathbf{r}})$ . En comparant cet hamiltonien avec celui d'une particule chargée plongée dans des champs électromagnétiques (éq. (1.10)), nous obtenons un potentiel vecteur artificiel de la forme

$$\mathbf{A}_{\text{artificiel}} = \frac{m\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}}{q} \quad (4.6)$$

auquel correspond un champ magnétique artificiel

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{\text{artificiel}} &= \nabla \times \mathbf{A}_{\text{artificiel}} \\ &= \frac{2m\boldsymbol{\Omega}}{q}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Remarquons que le passage dans le référentiel tournant influence également le potentiel de piégeage harmonique dans le plan  $x - y$  en diminuant  $\omega_{\perp}^2$  jusqu'à une valeur  $(\omega_{\perp}^2 - \Omega^2)$ . Cet effet est dû aux forces fictives d'inertie et plus spécifiquement à la force centrifuge [26, 36]. La réduction du potentiel de piégeage des atomes et les difficultés expérimentales à mettre des atomes piégés en rotation constituent les principaux inconvénients de cette méthode de création de potentiels de jauge artificiels.

## 4.2 Évolution adiabatique d'états habillés

Montrons à présent comment l'interaction entre un atome et un faisceau lumineux, et plus particulièrement l'évolution adiabatique de l'état d'un atome initialement dans un état habillé, peut conduire à l'émergence de champs de jauge artificiels.

### 4.2.1 Atomes à 2 niveaux

#### Dérivation des potentiels et champs de jauge artificiels

Dans un premier temps, nous considérons le cas simple d'atomes à deux niveaux. Nous avons déjà établi dans la section 3.2 du chapitre précédent l'expression de l'hamiltonien décrivant la dynamique interne de tels atomes plongés dans un faisceau laser ainsi que les états propres de cet hamiltonien. Comme nous nous intéressons également au mouvement global de l'atome, nous considérons l'hamiltonien [22]

$$\hat{H} = \left( \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + \hat{V} \right) \otimes \hat{\mathbf{1}}^{\text{int}} + \hat{\mathbf{1}}^{\text{ext}} \otimes \hat{H}_{2\text{niv}} \quad (4.8)$$

où  $\hat{\mathbf{P}}$  est l'opérateur impulsion de l'atome de masse  $m$  ( $\hat{\mathbf{P}} = \hbar \nabla / i$  en représentation des coordonnées),  $\hat{V}$  est un potentiel quelconque n'agissant pas sur la dynamique interne de l'atome,  $\hat{H}_{2\text{niv}}$ , donné par l'équation (3.44), décrit la dynamique interne de l'atome et où  $\hat{\mathbf{1}}^{\text{int}}$  et  $\hat{\mathbf{1}}^{\text{ext}}$  représentent respectivement l'opérateur identité dans l'espace d'Hilbert des états internes de l'atome et dans l'espace d'Hilbert des fonctions d'onde décrivant le mouvement global de l'atome. Notons que les angles  $\theta$  et  $\alpha$  apparaissant dans l'hamiltonien  $\hat{H}_{2\text{niv}}$  dépendent paramétriquement de la position  $\mathbf{r}$  de l'atome. Cette dépendance spatiale peut provenir soit d'une dépendance spatiale du désaccord en fréquence  $\delta$  du laser, soit d'une dépendance spatiale de la fréquence de Rabi  $\Omega$  associée à la transition entre les niveaux  $|e\rangle$  et  $|g\rangle$ .

Des solutions de base pour l'état global du système peuvent être trouvées sous la forme du produit d'une fonction décrivant le mouvement global de l'atome et d'une fonction spécifiant son état interne. La solution la plus générale sera une combinaison linéaire de ces solutions de base. Comme nous l'avons vu, les états propres de  $\hat{H}_{2\text{niv}}$ ,  $|\chi_+\rangle$  et  $|\chi_-\rangle$ , donnés par l'expression (3.46), forment une base orthonormée de l'espace des états internes de l'atome variant avec la position de l'atome au travers de  $\theta$  et  $\alpha$ . Notons au passage deux relations qui s'avéreront utiles pour le calcul des champs de jauge artificiels<sup>1 2</sup> :  $\langle \nabla \chi_{\pm} | \chi_{\mp} \rangle = -\langle \chi_{\pm} | \nabla \chi_{\mp} \rangle$  et  $\Im(i \langle \nabla \chi_{\pm} | \chi_{\pm} \rangle) = 0$  (avec  $\nabla | \chi_{\pm} \rangle \equiv | \nabla \chi_{\pm} \rangle$ ). En utilisant la base des états  $|\chi_{\pm}\rangle$  pour décrire l'état interne de l'atome, la fonction d'onde décrivant l'atome dans son entièreté s'écrit en toute généralité [22]

$$\langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle = \sum_{j=+,-} \psi_j(\mathbf{r}, t) | \chi_j(\mathbf{r}) \rangle. \quad (4.9)$$

Supposons que l'atome se trouve initialement dans l'état interne  $|\chi_+\rangle$ . Si il se déplace suffisamment lentement, le théorème adiabatique (c.f. section 2.1) nous enseigne qu'il reste au cours de son évolution dans l'état habillé  $|\chi_+(\mathbf{r})\rangle$ . Dans cette situation, la population de l'état  $|\chi_-\rangle$  reste négligeable au cours du temps et en conséquence la composante  $\psi_-(\mathbf{r}, t)$  aussi<sup>3</sup>. Dans cette situation, l'hamiltonien qui gouverne la dynamique du système est de la même forme que celui traité dans la section 2.2 lorsque nous avons étudié la dynamique d'un système contenant des degrés de liberté évoluant rapidement et d'autres évoluant lentement (c.f. équation (2.35)). Nous avons alors montré que la fonction d'onde décrivant l'évolution du système par rapport aux degrés de liberté lents évoluait suivant un hamiltonien effectif de la forme (2.37). Dans le cas de l'atome à deux niveaux, cela se traduit par le fait que l'équation de Schrödinger  $i\hbar d|\psi\rangle/dt = \hat{H}|\psi\rangle$  devient une équation d'évolution pour la fonction d'onde  $\psi_+(\mathbf{r}, t)$ . En insérant  $\langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle = \psi_+(\mathbf{r}, t) | \chi_+(\mathbf{r}) \rangle$  dans l'équation de Schrödinger et en projetant sur  $|\chi_+(\mathbf{r})\rangle$ , nous obtenons

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_+(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{(\hat{\mathbf{P}} - q_{\text{eff}} \mathbf{A})^2}{2m} + \hat{V} + \frac{\hbar \Omega}{2} + q_{\text{eff}} \phi \right) \psi_+(\mathbf{r}, t) \quad (4.10)$$

où  $\Omega$  est la fréquence de Rabi donnée par l'équation (3.33),  $\hat{V}$  est un potentiel n'agissant pas sur la dynamique interne de l'atome et où

$$q_{\text{eff}} \mathbf{A}(\mathbf{r}) = i\hbar \langle \chi_+ | \nabla \chi_+ \rangle = \frac{\hbar}{2} (\cos \theta - 1) \nabla \alpha \quad (4.11)$$

1. En effet, le calcul du gradient de  $\langle \chi_{\pm} | \chi_{\mp} \rangle = 0$  donne

$$\begin{aligned} 0 &= \nabla \langle \chi_{\pm} | \chi_{\mp} \rangle \\ &= \langle \nabla \chi_{\pm} | \chi_{\mp} \rangle + \langle \chi_{\pm} | \nabla \chi_{\mp} \rangle \end{aligned}$$

ce qui implique bien  $\langle \nabla \chi_{\pm} | \chi_{\mp} \rangle = -\langle \chi_{\pm} | \nabla \chi_{\mp} \rangle$ .

2. En effet, comme les états  $|\chi_{\pm}\rangle$  sont normés, nous avons

$$\begin{aligned} 0 &= \nabla \langle \chi_{\pm} | \chi_{\pm} \rangle \\ &= \langle \nabla \chi_{\pm} | \chi_{\pm} \rangle + \langle \chi_{\pm} | \nabla \chi_{\pm} \rangle. \end{aligned}$$

Or  $\langle \nabla \chi_{\pm} | \chi_{\pm} \rangle^* = \langle \chi_{\pm} | \nabla \chi_{\pm} \rangle$ , ce qui implique  $\langle \nabla \chi_{\pm} | \chi_{\pm} \rangle = -\langle \chi_{\pm} | \nabla \chi_{\pm} \rangle^*$  et montre bien que  $\langle \nabla \chi_{\pm} | \chi_{\pm} \rangle$  est imaginaire pur.

3. Une discussion plus complète de la validité de l'approximation adiabatique dans le cas où le mouvement global de l'atome est traité de manière classique peut être trouvée dans les références [22, 27].

et

$$q_{\text{eff}}\phi(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} |\langle \chi_- | \nabla \chi_+ \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{8m} [(\nabla\theta)^2 + \sin^2\theta(\nabla\alpha)^2]. \quad (4.12)$$

Tout se passe comme si l'atome avait acquis une charge électrique effective  $q_{\text{eff}}$ . Dans la suite, nous choisissons la valeur de cette charge artificielle  $q_{\text{eff}}$  égale à l'unité, hormis dans les figures, où cette charge effective sera prise égale à la charge élémentaire  $|e|$  afin de faciliter la comparaison avec des champs électromagnétiques agissant sur des ions. Le champ magnétique artificiel associé au potentiel vecteur (4.11) est donné par

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A} = \frac{\hbar}{2} \nabla(\cos\theta) \times \nabla\alpha. \quad (4.13)$$

Ce champ magnétique artificiel est non-nul lorsque les gradients des angles  $\theta$  et  $\alpha$  ne sont pas colinéaires. Dans cette situation, le mouvement de l'atome correspond à celui d'une particule chargée plongée dans un champ magnétique. Si  $\mathbf{B} \neq 0$ , il est impossible d'éliminer le potentiel vecteur  $\mathbf{A}$  au moyen d'une transformation de jauge [22]. Les potentiels vecteur et scalaire que nous avons obtenus sont également appelés potentiels géométriques car ils ne dépendent que de la variation spatiale des angles de phase  $\alpha$  et de mélange  $\theta$  [22]. Notons que nous pourrions choisir comme état interne initial  $|\chi_- \rangle$  au lieu de l'état  $|\chi_+ \rangle$ , ce qui conduirait au même résultat, au signe près, pour le potentiel vecteur [22]. Notons que les variations spatiales des angles  $\theta$  et  $\alpha$  proviennent soit de la variation spatiale du désaccord en fréquence  $\delta$ , soit de la variation spatiale de la fréquence de Rabi  $\Omega$ .

Nous pouvons également calculer les potentiels de jauge artificiels à partir des vecteurs propres de l'hamiltonien interne  $\hat{H}_{2\text{niv}}$  exprimés en fonction de  $\delta$  et  $\Omega$  tels que donnés par l'expression (3.41). Posons  $\Omega = |\Omega(\mathbf{r})|e^{i\varphi}$  où la phase  $\varphi$  est considérée constante. Si l'atome suit adiabatiquement l'état interne  $|\chi_{\pm}(\mathbf{r})\rangle$ , en appliquant le même raisonnement que précédemment, nous obtenons les potentiels de jauge artificiels

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{\pm}(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar \mathbf{k}_L}{2} \left( -1 \pm \frac{\delta(\mathbf{r})}{\sqrt{\delta(\mathbf{r})^2 + |\Omega(\mathbf{r})|^2}} \right) \\ \phi_{\pm}(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar^2}{8m} \left( \frac{|\mathbf{k}_L|^2 |\Omega(\mathbf{r})|^2}{\delta(\mathbf{r})^2 + |\Omega(\mathbf{r})|^2} + \frac{(\delta(\mathbf{r})|\nabla\Omega(\mathbf{r})| + |\Omega(\mathbf{r})||\nabla\delta(\mathbf{r})|)^2}{(\delta(\mathbf{r})^2 + |\Omega(\mathbf{r})|^2)^2} \right). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Remarquons que les potentiels scalaires sont identiques dans les deux cas. Les champs magnétiques artificiels associés à ces potentiels vecteurs sont donnés par

$$\mathbf{B}_{\pm}(\mathbf{r}) = \left( \pm \frac{\hbar |\Omega(\mathbf{r})| (|\Omega(\mathbf{r})|\nabla\delta(\mathbf{r}) - \delta(\mathbf{r})\nabla|\Omega(\mathbf{r})|)}{2(\delta(\mathbf{r})^2 + |\Omega(\mathbf{r})|^2)^{3/2}} \right) \times \mathbf{k}_L. \quad (4.15)$$

Si  $\delta(\mathbf{r}) = \delta_0$  et  $\Omega(\mathbf{r}) = \Omega_0$  avec  $\delta_0$  et  $\Omega_0$  constants, nous obtenons un champ magnétique artificiel strictement nul car le potentiel vecteur, bien que non nul, est constant. De tels potentiels de jauge artificiels peuvent être générés en utilisant, par exemple, des atomes alcalins et des faisceaux lasers gaussiens.

### Origine physique des potentiels de jauge artificiels

Donnons une interprétation physique aux potentiels vecteur et scalaire artificiels. Dans le cas où la dynamique du centre de masse est traitée de manière classique, le potentiel scalaire  $\phi$  peut être interprété comme l'énergie cinétique associée au micro-mouvement rapide de l'atome lorsqu'il absorbe ou émet des photons au cours de son évolution adiabatique [27]. De même, le terme  $(\hat{\mathbf{P}} - \mathbf{A})^2/2m$  correspond à l'énergie cinétique de mouvement lent du centre de masse de l'atome [27]. De plus, le potentiel vecteur artificiel  $\mathbf{A}$  est directement relié à la phase de Berry  $\gamma$  au travers des équations (2.17) et (2.18) dans lesquelles  $|n\rangle \rightarrow |\chi_{\pm}\rangle$ . Nous voyons en effet que le potentiel vecteur artificiel que nous venons de calculer est de la même forme que l'équation (2.17) [22].

Une autre manière d'interpréter les potentiels de jauge artificiels consiste à remarquer que le potentiel vecteur artificiel peut s'écrire

$$\mathbf{A}_{\pm}(\mathbf{r}) = i\hbar \langle \chi_{\pm} | \nabla \chi_{\pm} \rangle = -\langle \chi_{\pm} | \hat{\mathbf{P}} | \chi_{\pm} \rangle = -\langle \hat{\mathbf{P}} \rangle_{\chi_{\pm}}. \quad (4.16)$$

L'équation (4.16) montre que  $\mathbf{A}_\pm(\mathbf{r})$  est simplement la valeur moyenne de l'opérateur impulsion évaluée dans l'état interne  $|\chi_\pm(\mathbf{r})\rangle$ , ce qui confirme l'interprétation de l'expression  $(\hat{\mathbf{P}} - \mathbf{A}_\pm)^2/2m$  en tant qu'énergie cinétique du mouvement lent du centre de masse. Par ailleurs, si nous calculons la variance de l'opérateur impulsion  $\hat{\mathbf{P}}$  dans l'état interne  $|\chi_\pm(\mathbf{r})\rangle$ , nous obtenons

$$\begin{aligned}
(\Delta\hat{\mathbf{P}})_{\chi_\pm}^2 &= \langle\hat{\mathbf{P}}^2\rangle_{\chi_\pm} - \langle\hat{\mathbf{P}}\rangle_{\chi_\pm}^2 \\
&= \langle\chi_\pm|\hat{\mathbf{P}}^2|\chi_\pm\rangle - \langle\chi_\pm|\hat{\mathbf{P}}|\chi_\pm\rangle^2 \\
&= \langle\chi_\pm|\hat{\mathbf{P}}|\chi_\pm\rangle\langle\chi_\pm|\hat{\mathbf{P}}|\chi_\pm\rangle + \langle\chi_\pm|\hat{\mathbf{P}}|\chi_\mp\rangle\langle\chi_\mp|\hat{\mathbf{P}}|\chi_\pm\rangle - \langle\chi_\pm|\hat{\mathbf{P}}|\chi_\pm\rangle^2 \\
&= |\langle\chi_\mp|\hat{\mathbf{P}}|\chi_\pm\rangle|^2 \\
&= \hbar^2|\langle\chi_\mp|\nabla\chi_\pm\rangle|^2 \\
&= 2m\phi_\pm
\end{aligned} \tag{4.17}$$

où le passage de la deuxième à la troisième ligne se fait en insérant la relation de fermeture entre les opérateurs impulsions. En conséquence,  $\phi_\pm = (\Delta\hat{\mathbf{P}})_{\chi_\pm}^2/2m$ , ce qui montre que l'origine du potentiel scalaire se trouve dans les fluctuations de l'impulsion autour de la valeur moyenne et corrobore l'interprétation de ce potentiel comme l'énergie cinétique associée au micro-mouvement rapide de l'atome dû à son interaction avec le faisceau laser.

### Exemples

À titre d'exemple, considérons un faisceau laser monochromatique se propageant dans la direction  $\mathbf{e}_x$ , de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_L = (k_L, 0, 0)$  avec  $k_L = 2\pi/\lambda_L$  et  $\lambda_L$  la longueur d'onde du laser, possédant un profil gaussien dans la direction  $\mathbf{e}_y$  de *waist*  $w$  et homogène dans la direction  $\mathbf{e}_z$  [22]. Dans cette situation, le désaccord en fréquence est constant et la dépendance spatiale de la fréquence de Rabi est donnée par  $|\Omega(y)| = \Omega_0 \exp(-y^2/w^2)$ . Les potentiels scalaires et vecteurs artificiels associés à cette configuration sont illustrés respectivement sur les figures 4.1(a) et 4.1(c). Le champ magnétique artificiel est dirigé selon  $\mathbf{e}_z$  et son intensité vaut

$$B_\pm(y) = \pm \frac{\hbar k}{w} \frac{y}{w} \frac{|\Omega(y)|\delta}{(\delta^2 + |\Omega(y)|^2)^{3/2}}. \tag{4.18}$$

La figure 4.1(e) représente le profil spatial des champs magnétiques artificiels  $\mathbf{B}_\pm$ . Lorsque  $\Omega_0 \approx \delta$ , l'ordre de grandeur du produit du champ magnétique artificiel par la charge électrique artificielle est donné par  $\hbar k/w$ . Pour un faisceau laser de longueur d'onde de quelques centaines de nm, de *waist* d'une centaine de  $\mu\text{m}$ , et pour une charge électrique artificielle égale à la charge élémentaire  $|e|$ , nous obtenons un champ magnétique artificiel dont l'intensité est de l'ordre de  $10^{-4}$  T (voir figure 4.1(e)). Remarquons que lorsque le rapport  $\Omega_0/\delta$  augmente, la valeur maximale du champ magnétique artificiel augmente, ce qui permet d'atteindre des valeurs de champ magnétique artificiel importantes, mais dans une région de l'espace qui devient de plus en plus petite [22].

Déterminons les densités de charge et de courant électrique qui donneraient lieu à des potentiels identiques aux potentiels de jauge artificiels (4.14). Dans ce but, insérons l'expression (1.4) du champ électrique en fonction des potentiels de jauge dans la loi de Gauss (1.3). Comme les potentiels de jauge que nous considérons sont indépendants du temps, nous obtenons

$$\rho = -\epsilon_0 \Delta\phi \tag{4.19}$$

où  $\epsilon_0$  est la permittivité du vide et  $\phi$  le potentiel scalaire. La figure 4.1(b) représente la densité de charge qui engendrerait un potentiel scalaire identique à  $\phi^{(\pm)}$ . Comme le profil spatial du faisceau laser ne dépend que de la coordonnée  $y$ , il en est de même pour  $\phi^{(\pm)}$  et les densités de charge  $\rho^{(\pm)}$  sont proportionnelles à l'opposé de la dérivée seconde de ces potentiels.

Afin d'obtenir l'expression de la densité de courant qui engendrerait des potentiels vecteurs identiques aux potentiels vecteurs artificiels, introduisons l'expression (1.4) du champ magnétique en

fonction du potentiel vecteur dans la loi d'Ampère (1.3) pour des champs stationnaires,

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \mu_0 \mathbf{j} \Leftrightarrow \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \Delta \mathbf{A} = \mu_0 \mathbf{j} \quad (4.20)$$

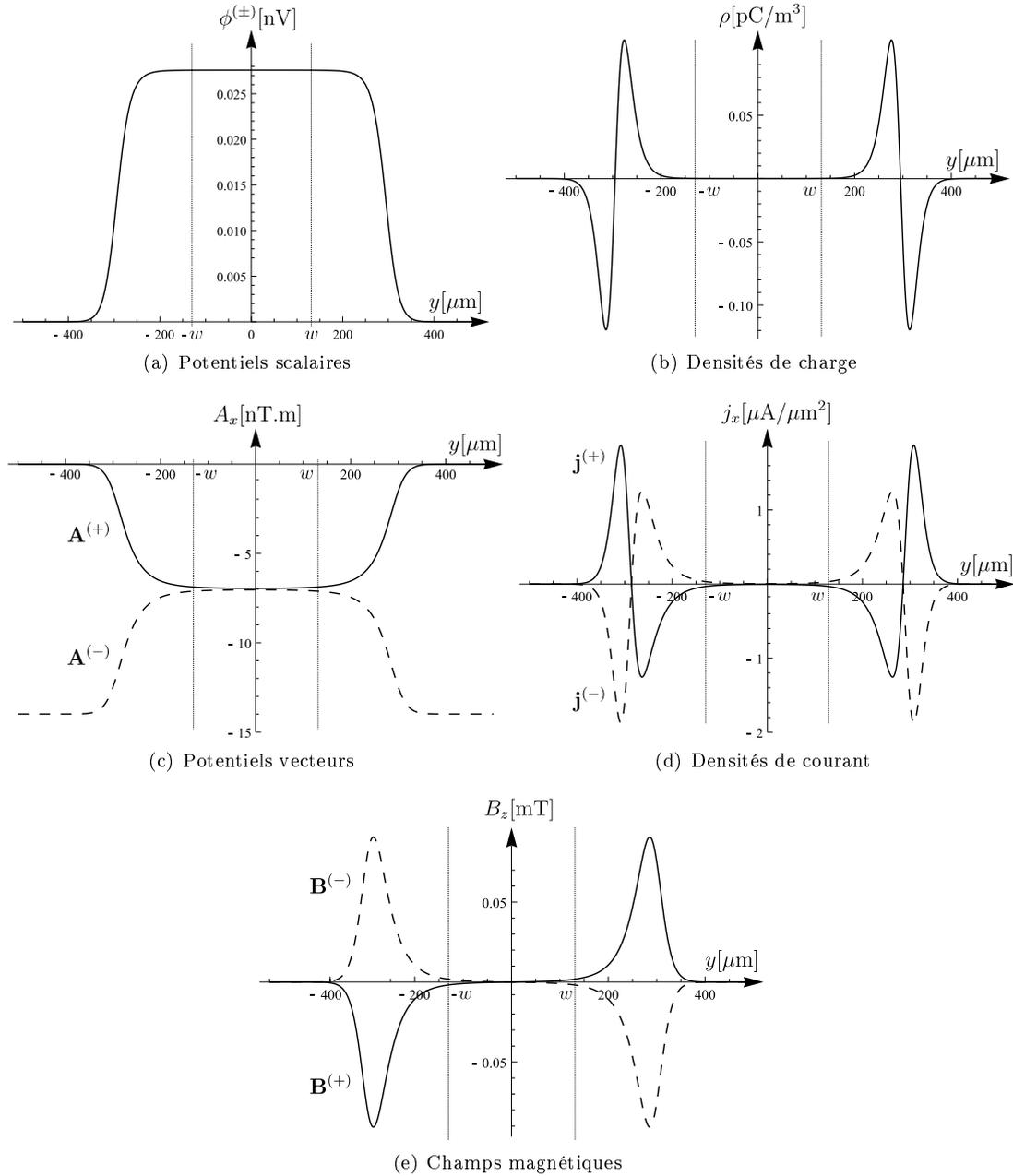


FIGURE 4.1 – Champs de jauge artificiels résultant de l'interaction d'un atome à deux niveaux avec un faisceau laser de longueur d'onde  $\lambda_L = 296$  nm se propageant dans la direction  $\mathbf{e}_x$ , de profil gaussien dans la direction  $\mathbf{e}_y$  ( $w = 130$   $\mu\text{m}$ ,  $\Omega_0/2\pi = 260$  MHz) et homogène selon  $\mathbf{e}_z$ , en fonction de la coordonnée  $y$ . Le désaccord en fréquence est homogène et est choisi égal à 10 MHz. (a) Potentiels scalaires artificiels. (b) Densités de charge électrique qui engendreraient de tels potentiels scalaires. (c) Composantes selon  $\mathbf{e}_x$  des potentiels vecteurs artificiels. (d) Composantes selon  $\mathbf{e}_x$  des densités de courant qui engendreraient de tels potentiels vecteurs. (e) Composantes selon  $\mathbf{e}_z$  des champs magnétiques artificiels. Le waist  $w$  du faisceau gaussien est indiqué sur les différents graphiques.

où  $\mu_0$  est la perméabilité du vide. Dans la jauge de Coulomb ( $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ ), nous obtenons ainsi

$$\mathbf{j} = -\frac{\Delta \mathbf{A}}{\mu_0}. \quad (4.21)$$

Pour le faisceau gaussien considéré précédemment, la divergence des potentiels vecteurs artificiels est nulle et les densités de courant qui donneraient lieu à ces potentiels vecteurs sont proportionnelles au vecteur d'onde du laser et ont pour expression

$$\mathbf{j}^{(\pm)}(y) = \pm \frac{\hbar \delta \Omega_0^2 \left[ \delta e^{2y^2/w^2} (4y^2 - w^2) - (2y^2 + w^2) \Omega_0^2 \right]}{\mu_0 w^4 (\delta^2 e^{2y^2/w^2} + \Omega_0^2) \sqrt{\delta^2 + \Omega_0^2 e^{-2y^2/w^2}}} \mathbf{k}_L. \quad (4.22)$$

Ces densités de courant sont représentées sur la figure 4.1(d). De nouveau, le laplacien du potentiel vecteur artificiel se réduit, dans ce cas, à une dérivée seconde par rapport à  $y$ . L'effet du faisceau laser peut s'interpréter comme provenant de densités de charge et de courant artificielles (4.22), sources des potentiels de jauge artificiels (4.14) ressentis par l'atome qui a ainsi acquis une charge effective.

### 4.2.2 Atomes à 3 niveaux

Intéressons-nous aux champs de jauge artificiels résultant de l'interaction d'atomes à trois niveaux en configuration  $\Lambda$  avec deux faisceaux lasers. L'hamiltonien global de l'atome s'écrit

$$\hat{H} = \left( \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + \hat{V} \right) \otimes \hat{\mathbb{1}}^{\text{int}} + \hat{\mathbb{1}}^{\text{ext}} \otimes \hat{H}_{3\text{niv}} \quad (4.23)$$

où  $\hat{V}$  est un potentiel n'agissant pas sur la dynamique interne de l'atome et  $\hat{H}_{3\text{niv}}$ , donné par l'équation (3.58), décrit la dynamique interne de l'atome<sup>4</sup> [22]. Les fréquences de Rabi  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$  intervenant dans  $\hat{H}_{3\text{niv}}$  et définies par l'équation (3.53) peuvent en toute généralité varier dans l'espace et dans le temps. Comme nous l'avons vu, les états propres de  $\hat{H}_{3\text{niv}}$  sont donnés par les expressions (3.59) et (3.60). De manière similaire au cas d'un atome à deux niveaux, la fonction d'onde totale de l'atome peut toujours s'écrire

$$\langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle = \sum_{j=D,\pm} \psi_j(\mathbf{r}, t) |j(\mathbf{r})\rangle. \quad (4.24)$$

où les fonctions d'onde  $\psi_j(\mathbf{r}, t)$  décrivent le mouvement global de l'atome lorsqu'il se trouve dans l'état interne  $|j(\mathbf{r})\rangle$  ( $j = D, \pm$ ) [22]. Si nous supposons l'atome initialement dans l'état sombre<sup>5</sup>, et sous les conditions d'applicabilité du théorème adiabatique, l'état global du système au temps  $t$  est donné par  $\langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle \approx \psi_D(\mathbf{r}, t) |D(\mathbf{r})\rangle$ , les états  $|\pm\rangle$  n'étant jamais peuplés. En injectant cette expression dans l'équation de Schrödinger, en projetant sur  $|D\rangle$  et en utilisant la définition de l'état couplé  $|B\rangle$  donné par l'équation (3.61), nous obtenons l'équation décrivant l'évolution de  $\psi_D$  [22]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_D(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{(\hat{\mathbf{P}} - \mathbf{A})^2}{2m} + \hat{V} + \phi \right) \psi_D(\mathbf{r}, t) \quad (4.25)$$

avec

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = i\hbar \langle D | \nabla D \rangle \quad \text{et} \quad \phi(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} |\langle B | \nabla D \rangle|^2. \quad (4.26)$$

De manière similaire au cas d'un atome à deux niveaux, les potentiels de jauge  $\mathbf{A}$  et  $\phi$  émergent de l'élimination adiabatique des états  $|\pm\rangle$  et proviennent de la variation spatiale de l'état sombre.

4. Nous nous limitons ici au cas où les désaccords en fréquence  $\delta_1$  et  $\delta_2$  sont nuls.

5. D'un point de vue expérimental, l'état sombre  $|D\rangle$  présente l'avantage de ne contenir aucune composante de l'état excité  $|e\rangle$  et permet pour cette raison de s'affranchir du problème de l'émission spontanée.

Plusieurs configurations expérimentales utilisant des atomes à trois niveaux ont été proposées. Il est ainsi possible de générer des champs de jauge artificiels au moyen de faisceaux lasers possédant un moment angulaire orbital [29, 39]. Une autre méthode consiste à utiliser des faisceaux lasers gaussiens se propageant en sens opposés selon le même axe mais décalés spatialement l'un par rapport à l'autre [22, 30]. Illustrons cette situation dans le cas de deux faisceaux lasers se propageant en sens opposés selon  $\mathbf{e}_x$  et possédant chacun un profil gaussien de *waist*  $w$  selon  $\mathbf{e}_y$  et homogène selon  $\mathbf{e}_z$ . Les maxima des deux profils gaussiens sont séparés d'une distance  $2a$ . Les désaccords en fréquence sont choisis nuls. Supposons également que les niveaux  $|g_1\rangle$  et  $|g_2\rangle$  ont des énergies très proches, ce qui permet de poser  $|\mathbf{k}_{L_1}| \approx |\mathbf{k}_{L_2}| = k_L$ . Les fréquences de Rabi des deux lasers valent dans ce cas

$$\Omega_i(\mathbf{r}) = \Omega_0 e^{\pm i k_L x} e^{-(y \pm a)^2/w^2}, \quad i = 1, 2. \quad (4.27)$$

En appliquant les formules (4.26) pour calculer les potentiels vecteur et scalaire, nous obtenons

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \hbar k_L \tanh\left(\frac{4ay}{w^2}\right) \quad \text{et} \quad \phi(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2(4a^2 + k_L^2 w^4)}{2m} \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{4ay}{w^2}\right)}. \quad (4.28)$$

Ces potentiels de jauge sont illustrés sur les figures 4.2(a) et 4.2(c). Le champ magnétique artificiel associé à ce potentiel vecteur, illustré sur la figure 4.2(e), est dirigé selon  $\mathbf{e}_z$  et vaut [22]

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{4\hbar k_L a}{w^2} \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{4ay}{w^2}\right)} \mathbf{e}_z. \quad (4.29)$$

Il présente un maximum  $B_{\max} = 4\hbar k_L a/w^2$  en  $y = 0$ . Pour une longueur d'onde des lasers de l'ordre de quelques centaines de nm, un *waist* d'une centaine de microns et  $a$  de l'ordre d'une dizaine de microns, nous obtenons une valeur maximale du champ magnétique artificiel dont l'effet est équivalent à celui d'un champ magnétique réel de  $10^{-4}$  T appliqué sur une particule ayant la même charge que l'électron.

Pour des systèmes atomiques à trois niveaux, nous pouvons également évaluer les densités de courant et de charge électrique qui produiraient des potentiels scalaire et vecteur identiques à ceux provenant de l'évolution adiabatique de l'état sombre  $|D\rangle$ . La densité de charge peut être calculée à partir de l'équation (4.19) dans laquelle nous insérons l'expression du potentiel scalaire artificiel (4.28). Comme la fréquence de Rabi ne dépend que de la coordonnée  $y$ , le laplacien se ramène à la dérivée seconde et nous obtenons

$$\rho(y) = \frac{16\epsilon_0 \hbar^2 a^2 (4a^2 + k_L^2 w^4)}{m w^8} \frac{(1 - 2 \sinh^2(4ay/w^2))}{\cosh^4(4ay/w^2)} \quad (4.30)$$

Cette densité de charge est illustrée sur la figure 4.2(b). Établissons l'expression de la densité de courant qui engendrerait le potentiel vecteur (4.28). La divergence de ce potentiel est nulle. En utilisant les équations (4.21) et (4.28), nous obtenons

$$\mathbf{j}(y) = \frac{32\hbar a^2}{\mu_0 w^4} \frac{\tanh(4ay/w^2)}{\cosh^2(4ay/w^2)} \mathbf{k}_L. \quad (4.31)$$

La figure 4.2(d) représente la composante selon  $\mathbf{e}_x$  de cette densité de courant. Remarquons que de manière similaire au cas des atomes à deux niveaux, la densité de courant est directement proportionnelle au vecteur d'onde des faisceaux lasers. Bien que les profils des densités de charge et de courant que nous venons d'établir ne soient pas identiques à celui des faisceaux lasers, nous pouvons donner une interprétation de l'action des champs lasers sur la dynamique atomique. Les champs lasers peuvent être considérés comme la source de densités de charge et de courant électrique artificielles données par les expressions (4.30) et (4.31). Ces densités de charge et de courant artificielles génèrent des potentiels de jauge artificiels agissant sur la dynamique atomique de manière strictement identique à des potentiels de jauge réels.

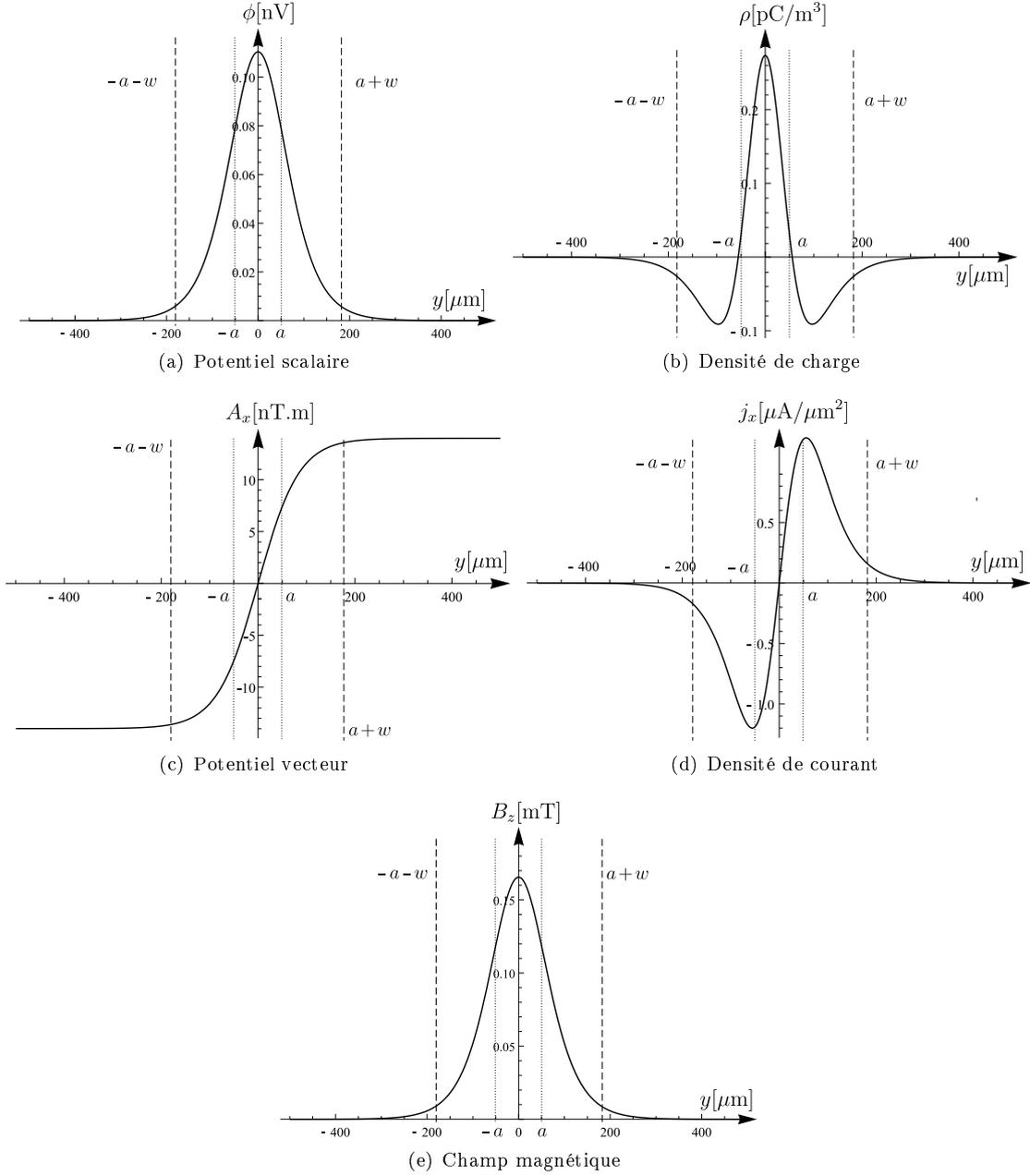


FIGURE 4.2 – Champ et potentiels de jauge artificiels résultant de l'interaction d'un atome à trois niveaux en configuration  $\Lambda$  avec deux faisceaux lasers gaussiens ( $w = 130 \mu\text{m}$ ,  $\Omega_0 = 260 \text{ MHz}$  et  $\lambda_L = 296 \text{ nm}$ ) se propageant dans la direction  $\mathbf{e}_x$  en sens opposés et décalés selon  $\mathbf{e}_y$  d'une distance  $2a = 100 \mu\text{m}$ , en fonction de  $y$ . Les désaccords en fréquence  $\delta_1$  et  $\delta_2$  sont choisis nuls. (a) Potentiel scalaire artificiel. (b) Densité de charge électrique qui engendrerait un tel potentiel scalaire. (c) Composante selon  $\mathbf{e}_x$  du potentiel vecteur artificiel. (d) Composante selon  $\mathbf{e}_x$  de la densité de courant qui engendrerait un tel potentiel vecteur. (e) Composante selon  $\mathbf{e}_z$  du champ magnétique artificiel. La position des lasers est représentée par des lignes verticales en traits discontinus, et le waist des lasers par des lignes verticales pointillées.

### 4.2.3 Cas général

Il est possible de généraliser l'analyse aboutissant à l'obtention de potentiels de jauge artificiels à des systèmes composés d'un nombre arbitraire de niveaux. Considérons un système possédant  $N$  degrés de liberté internes, typiquement un atome à  $N$  niveaux, plongé dans des faisceaux lasers. Comme précédemment, l'interaction entre la lumière et les atomes est traitée de manière semi-classique. Les états propres  $\{|j(\mathbf{r})\rangle, j = 1, \dots, N\}$  d'énergies propres  $E_j(\mathbf{r})$  associés à l'hamiltonien décrivant la dynamique interne de l'atome couplé à la lumière forment une base orthonormée de l'espace d'Hilbert à  $N$  dimensions associé à cette dynamique interne [27]. L'équation de Schrödinger décrivant complètement la dynamique de l'atome s'écrit

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \left[ \left( \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + \hat{V} \right) \otimes \hat{1}^{\text{int}} + \hat{1}^{\text{ext}} \otimes \hat{H}_N \right] |\psi(t)\rangle \quad (4.32)$$

avec

$$\hat{H}_N = \sum_{j=1}^N E_j(\mathbf{r}) |j(\mathbf{r})\rangle \langle j(\mathbf{r})|. \quad (4.33)$$

L'état global du système s'écrit en représentation des positions

$$\langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle = \sum_{j=1}^N \psi_j(\mathbf{r}, t) |j(\mathbf{r})\rangle \quad (4.34)$$

où les fonctions d'onde  $\psi_j(\mathbf{r}, t)$  décrivent le mouvement du centre de masse de l'atome. Supposons que l'atome se trouve initialement dans l'état  $|1(\mathbf{r})\rangle$  et que cet état est bien séparé des autres états propres de manière à éviter les croisements de niveaux lorsque l'atome suit adiabatiquement cet état interne. De plus, considérons que l'atome se déplace suffisamment lentement pour que le théorème adiabatique soit d'application. Dans cette situation, l'atome reste dans l'état interne  $|1(\mathbf{r})\rangle$  et l'état global de l'atome est donné à tout instant par  $\langle \mathbf{r} | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle = \psi_1(\mathbf{r}, t) |1(\mathbf{r})\rangle$  où l'énergie  $E_1(\mathbf{r})$  joue le rôle d'énergie potentielle pour le mouvement du centre de masse de l'atome [27]. De plus, si nous injectons l'expression de  $\langle \mathbf{r} | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle$  dans l'équation de Schrödinger, nous obtenons un hamiltonien effectif pour le mouvement du centre de masse de l'atome [27]

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \frac{(\hat{\mathbf{P}} - \mathbf{A})^2}{2m} + \hat{V} + \phi + E_1(\mathbf{r}) \quad (4.35)$$

avec

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = i\hbar \langle 1(\mathbf{r}) | \nabla | 1(\mathbf{r}) \rangle \quad (4.36)$$

et

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j \neq 1} |\langle 1(\mathbf{r}) | \nabla | j(\mathbf{r}) \rangle|^2. \quad (4.37)$$

L'expression ainsi obtenue pour les potentiels de jauge artificiels généralise bien les expressions obtenues précédemment. L'interprétation des potentiels scalaire et vecteur artificiels proposée dans le cas d'atomes ne possédant que deux niveaux internes reste valide dans le cas général.

### 4.2.4 Champs de jauge artificiels non-abéliens

Jusqu'à présent, nous avons montré qu'il était possible de créer, grâce à l'interaction entre la lumière et des atomes, des champs de jauge artificiels qui ont la même forme que ceux décrivant le champ électromagnétique. Il est également possible de générer des champs de jauge non-abéliens en utilisant le même principe [22, 34, 40].

Considérons un atome possédant  $N$  niveaux internes couplés à des champs lasers. Comme nous l'avons vu, sa dynamique interne peut être décrite par l'hamiltonien  $\hat{H}_N$  donné par l'équation (4.33)

qui a pour états propres les états habillés  $\{|j(\mathbf{r})\rangle, j = 1, \dots, N+1\}$  d'énergies propres  $E_j(\mathbf{r})$ . La fonction d'onde globale de l'atome est quant à elle donnée par l'équation (4.34).

Si un ensemble d'états habillés  $\{|1(\mathbf{r})\rangle, \dots, |q(\mathbf{r})\rangle\}$  ( $q \leq N$ ) est dégénéré pour toute valeur du paramètre  $\mathbf{r}$ , c'est-à-dire en tout point de l'espace, et que le système suit adiabatiquement une combinaison linéaire de ces états dégénérés, l'élimination adiabatique des autres états conduit à des potentiels de jauge non-abéliens [22, 40]. Plus précisément, supposons que les  $q$  premières énergies propres forment un sous-espace dégénéré  $\mathcal{E}_q$  et que l'atome est initialement préparé dans un état appartenant à ce sous-espace. Si, de plus, l'atome se déplace suffisamment lentement pour que le théorème adiabatique soit d'application, l'état interne de l'atome restera dans  $\mathcal{E}_q \equiv \{|1(\mathbf{r})\rangle, \dots, |q(\mathbf{r})\rangle\}$ . En projetant l'équation de Schrödinger (4.32) sur ce sous-espace, nous obtenons l'équation d'évolution pour le vecteur colonne à  $q$  dimensions  $\Psi = (\psi_1, \dots, \psi_q)^T$  [22, 40]

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left( \frac{(\hat{\mathbf{P}} - \mathbf{A}(\mathbf{r}))^2}{2m} + (V + E(\mathbf{r}))\hat{\mathbb{1}}_q + \Phi(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (4.38)$$

avec  $\hat{\mathbb{1}}_q$  la matrice identité dans l'espace  $\mathcal{E}_q$ ,  $E(\mathbf{r})$  l'énergie propre commune des états dégénérés  $|j(\mathbf{r})\rangle$ ,  $j = 1, \dots, q$  et  $V$  une fonction scalaire décrivant un éventuel potentiel n'agissant pas sur la dynamique interne. Contrairement au cas où nous suivions adiabatiquement un seul état, les potentiels vecteur et scalaire  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  et  $\Phi(\mathbf{r})$  sont maintenant des matrices  $q \times q$ . Les éléments de ces matrices valent [22, 40]

$$\mathbf{A}(\mathbf{r})_{n,m} = i\hbar \langle n(\mathbf{r}) | \nabla m(\mathbf{r}) \rangle \quad (4.39)$$

et

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{-\hbar^2}{2m} \sum_{l=q+1}^N \langle n(\mathbf{r}) | \nabla l(\mathbf{r}) \rangle \langle l(\mathbf{r}) | \nabla m(\mathbf{r}) \rangle \quad (4.40)$$

avec  $n, m \in (1, \dots, q)$ . Remarquons que les états  $\{|1\rangle, \dots, |q\rangle\}$  étant dégénérés, toutes les bases générées par une transformation unitaire  $\hat{U}$  appliquée sur les états  $\{|1\rangle, \dots, |q\rangle\}$  sont équivalentes. Une transformation unitaire locale  $\hat{U}(\mathbf{r})$  sur l'état du système  $\Psi$ ,

$$\Psi \rightarrow \hat{U}(\mathbf{r})\Psi, \quad (4.41)$$

correspond sur les potentiels  $(\mathbf{A}, \Phi)$  à une transformation de la forme (1.41), ce qui donne à ces potentiels la signification de potentiels de jauge [40]. Le champ magnétique associé au potentiel vecteur  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  a pour composantes

$$B_i = \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} F_{kl} \quad (4.42)$$

avec

$$F_{kl} = \partial_k A_l - \partial_l A_k + \frac{i}{\hbar} [A_k, A_l]. \quad (4.43)$$

Notons que le terme  $(\epsilon_{ikl} [A_k, A_l])/2$  n'est en général pas nul car les composantes vectorielles de  $\mathbf{A}$  ne commutent pas nécessairement, ce qui a pour conséquence que  $\mathbf{B}$  peut être non-nul même pour un potentiel scalaire uniforme dans l'espace [22]. Cette propriété est une conséquence du caractère non-abélien du champ de jauge.

### 4.2.5 Première réalisation expérimentale

Une équipe de chercheurs a récemment réussi à produire expérimentalement des champs de jauge artificiels sur des atomes de rubidium 87 [31–33]. Cette expérience consiste à plonger un condensat de Bose-Einstein formé d'atomes de  $^{87}\text{Rb}$  dans l'état fondamental  $5S_{1/2}F = 1$  dans deux faisceaux lasers Raman se propageant dans la direction  $\mathbf{e}_x$  mais en sens opposés. Un des lasers a une fréquence  $\omega_L$  et est polarisé linéairement selon  $\mathbf{e}_z$ . Cette polarisation peut être décomposée comme une somme des polarisations  $\sigma^+$  et  $\sigma^-$ . Le second faisceau laser est polarisé linéairement selon  $\mathbf{e}_y$  et sa fréquence vaut

$\omega_L + \Delta\omega_L$ . Le condensat est également placé dans un champ magnétique  $\mathbf{B}_0$  orienté selon  $\mathbf{e}_y$  qui produit un décalage des niveaux dû à l'effet Zeeman valant  $g\mu_B m_F B_0 \equiv \hbar\omega_z$  où  $g$  est le facteur de Landé,  $\mu_B$  le magnéton de Bohr et  $m_F$  le nombre quantique magnétique tel que  $\hat{F}_z|F, m_F\rangle = \hbar m_F|F, m_F\rangle$  avec  $\hat{F}_z$  la composante selon  $\mathbf{e}_z$  du moment cinétique total de l'atome [31]. L'effet de ces deux faisceaux lasers est de coupler par une transition Raman les états  $|m_F, k_x\rangle$ . Seuls les états dont la différence de moment angulaire est égale à  $\hbar$  (c'est-à-dire  $\Delta m_F = \pm 1$ ) sont couplés. L'impulsion  $\hbar k_x$  de ces états diffère de  $2\hbar k_R$  où  $\hbar k_R = h/\lambda$  est l'impulsion de recul associée à l'absorption ou l'émission d'un photon de longueur d'onde  $\lambda$ . Au final, seuls les trois états  $\{|-1, \tilde{k}_x + 2k_R\rangle, |0, \tilde{k}_x\rangle, |+1, \tilde{k}_x - 2k_R\rangle\}$  labellés par le vecteur d'onde  $\tilde{k}_x$  de quasi-impulsion<sup>6</sup> sont couplés par les lasers Raman [31]. Comme le transfert d'impulsion lors de l'absorption ou la réémission de photons se déroule uniquement selon  $\mathbf{e}_x$ , l'hamiltonien à une particule peut s'écrire

$$\hat{H} = \hat{H}_1(k_x) + \left[ \frac{\hbar^2(k_y^2 + k_z^2)}{2m} + \hat{V}(\mathbf{r}) \right] \otimes \hat{\mathbb{1}}^{\text{int}} \quad (4.44)$$

avec  $\hat{V}(\mathbf{r})$  le potentiel de piégeage des atomes,  $\hat{\mathbb{1}}^{\text{int}}$  l'opérateur identité dans l'espace de spins,  $m$  la masse de l'atome et où  $\hat{H}_1$  est l'hamiltonien décrivant le mouvement dans la direction  $\mathbf{e}_x$  ainsi que le couplage Raman entre les différents niveaux  $m_F = -1, 0$  et  $1$ . Après avoir effectué l'approximation de l'onde tournante, l'hamiltonien  $\hat{H}_1$  s'exprime dans la base  $\{|-1, \tilde{k}_x + 2k_R\rangle, |0, \tilde{k}_x\rangle, |+1, \tilde{k}_x - 2k_R\rangle\}$  par [31, 41]

$$\hat{H}_1(\tilde{k}_x) = \hbar \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2m}(\tilde{k}_x + 2k_R)^2 - \delta & \frac{\Omega_R}{2} & 0 \\ \frac{\Omega_R}{2} & \frac{\hbar}{2m}\tilde{k}_x^2 - \epsilon & \frac{\Omega_R}{2} \\ 0 & \frac{\Omega_R}{2} & \frac{\hbar}{2m}(\tilde{k}_x - 2k_R)^2 + \delta \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

avec  $\delta = \Delta\omega_L - \omega_z$  le désaccord en fréquence par rapport à la résonance de la transition à deux photons,  $\Omega_R$  la fréquence de Rabi de la transition Raman et  $\epsilon$  le décalage Zeeman quadratique.

Bien que dans la situation que nous décrivons l'émergence de potentiels de jauge artificiels provient de la variation spatiale des états habillés (états propres de  $\hat{H}_1(k_x)$ ), nous utiliserons ici une manière différente de voir les choses. Pour chaque valeur de  $\tilde{k}_x$ , il est possible de calculer les énergies propres  $E_j(\tilde{k}_x)$  ( $j = 1, 2, 3$ ) de l'hamiltonien  $\hat{H}_1(\tilde{k}_x)$ . L'énergie  $E_j(\tilde{k}_x)$  correspond à la relation de dispersion d'un atome se trouvant dans l'état habillé  $|j\rangle$ . Notons que ces relations de dispersion dépendent des paramètres expérimentaux  $\delta$ ,  $\Omega_R$  et  $\epsilon$ , ce qui a pour conséquence que le nombre de minima et leurs positions  $\tilde{k}_{\text{min}}$  peuvent être modulés expérimentalement [31]. Par analogie avec l'hamiltonien (1.10) d'une particule plongée dans des champs électromagnétiques, le potentiel de jauge artificiel émerge en prenant l'expansion des énergies propres  $E_j(\tilde{k}_x)$  autour d'un minimum

$$E_j(\tilde{k}_x) = \frac{\hbar^2}{2m_{\text{eff}}}(\tilde{k}_x - \tilde{k}_{\text{min}})^2 \quad (4.46)$$

où  $m_{\text{eff}}$  est la masse effective et où  $\tilde{k}_{\text{min}} \equiv q_{\text{eff}} A_x / \hbar$  avec  $q_{\text{eff}}$  la charge effective et  $A_x$  le potentiel de jauge artificiel [31]. Dans la situation que nous venons de considérer, cela conduit à un potentiel vecteur artificiel homogène aux alentours de l'origine, dont les champs électrique et magnétique associés sont nuls [31].

Au moyen d'un dispositif similaire, il est possible de produire un potentiel vecteur artificiel variable dans l'espace. Dans cet objectif, il suffit de rendre le désaccord en fréquence  $\delta$  dépendant de la position  $\mathbf{r}$  en utilisant un champ magnétique réel de la forme  $\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 + \mathbf{b}'(y)$  de manière à générer un décalage Zeeman des niveaux variable dans l'espace. Cette configuration conduit à un champ magnétique artificiel constant [33]. De même, si le désaccord en fréquence change au cours du temps, le potentiel vecteur artificiel dépendra également du temps, ce qui permet de générer un champ électrique artificiel [32].

6. La quasi-impulsion est définie comme l'impulsion modulo  $2\hbar k_R$ .

## Chapitre 5

# Champs de jauge artificiels pour deux atomes indépendants

Dans ce chapitre et le chapitre 7, nous étudions la génération de potentiels de jauge artificiels dans des systèmes à deux atomes, induits par l'évolution adiabatique d'états habillés. Nous nous focalisons sur cette configuration car elle n'a jamais été étudiée auparavant et a l'avantage de présenter des solutions analytiques. De plus, les technologies actuelles la rendent accessible à l'expérience. Dans ce chapitre, nous nous intéressons plus particulièrement au cas de deux atomes à deux niveaux indépendants. Les résultats obtenus serviront de point de comparaison par la suite. Dans le chapitre 7, nous analyserons la même situation pour deux atomes avec interaction dipolaire électrique.

Comme nous l'avons vu précédemment, l'état interne d'un atome à deux niveaux en interaction avec un champ laser est décrit dans l'approximation dipolaire électrique par l'hamiltonien  $\hat{H}_{2\text{niv}}$ , dont la représentation dans la base des états non couplés  $\{|e\rangle, |g\rangle\}$  est donnée par l'expression (3.40). La dynamique interne du système constitué de deux atomes à deux niveaux indépendants,  $a$  et  $b$ , en interaction avec un champ laser de pulsation  $\omega_L$  et de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_L$  est décrite par l'hamiltonien

$$\hat{H}_{\text{ind}} = \hat{H}_{2\text{niv},a} \otimes \hat{\mathbb{1}}_b^{\text{int}} + \hat{\mathbb{1}}_a^{\text{int}} \otimes \hat{H}_{2\text{niv},b} \quad (5.1)$$

où  $\hat{\mathbb{1}}_\alpha^{\text{int}}$  ( $\alpha = a, b$ ) est l'opérateur identité agissant sur l'espace des états internes de la particule  $\alpha$ . En notation matricielle et dans la base des états non couplés  $\{|ee\rangle, |eg\rangle, |ge\rangle, |gg\rangle\}$ <sup>1</sup>, nous avons

$$\hat{H}_{\text{ind}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\delta_a - \delta_b & \Omega_b e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_b} & \Omega_a e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_a} & 0 \\ \Omega_b^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_b} & -\delta_a + \delta_b & 0 & \Omega_a e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_a} \\ \Omega_a^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_a} & 0 & \delta_a - \delta_b & \Omega_b e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_b} \\ 0 & \Omega_a^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_a} & \Omega_b^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_b} & \delta_a + \delta_b \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

où  $\Omega_\alpha = \Omega(\mathbf{r}_\alpha)$ ,  $\delta_\alpha = \delta(\mathbf{r}_\alpha)$  et où  $\mathbf{r}_\alpha$  est la position de l'atome  $\alpha$  que nous traitons comme un paramètre. Les énergies et états propres de l'hamiltonien  $\hat{H}_{\text{ind}}$  se déduisent directement des énergies  $E_\pm$  et des états propres  $|\chi_\pm\rangle$  de  $\hat{H}_{2\text{niv}}$  (c.f. éq. (3.41)),

$$E_{ij}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = E_i(\mathbf{r}_a) + E_j(\mathbf{r}_b) \quad (5.3)$$

de vecteur propre

$$|\chi_{ij}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)\rangle = |\chi_i(\mathbf{r}_a)\rangle_a \otimes |\chi_j(\mathbf{r}_b)\rangle_b \quad (5.4)$$

où  $i, j = \pm$ .

De manière similaire aux résultats obtenus dans la section 4.2, montrons comment l'évolution adiabatique de l'état interne des deux atomes conduit à des potentiels de jauge artificiels. Dans ce

---

1. La notation  $|eg\rangle$  signifie  $|e\rangle_a \otimes |g\rangle_b$

but, considérons l'hamiltonien global du système à deux atomes, c'est-à-dire l'hamiltonien décrivant le mouvement spatial des atomes ainsi que leur dynamique interne. Nous avons

$$\hat{H} = \left( \frac{\hat{\mathbf{P}}_a^2}{2m_a} \otimes \hat{\mathbb{1}}_b^{\text{ext}} + \hat{\mathbb{1}}_a^{\text{ext}} \otimes \frac{\hat{\mathbf{P}}_b^2}{2m_b} + \hat{V} \right) \otimes \hat{\mathbb{1}}_a^{\text{int}} \otimes \hat{\mathbb{1}}_b^{\text{int}} + \hat{\mathbb{1}}_a^{\text{ext}} \otimes \hat{\mathbb{1}}_b^{\text{ext}} \otimes \hat{H}_{\text{ind}} \quad (5.5)$$

où  $\hat{\mathbf{P}}_\alpha$  est l'opérateur impulsion de l'atome  $\alpha$  ( $\hat{\mathbf{P}}_\alpha = \hbar \nabla_{\mathbf{r}_\alpha} / i$  en représentation des coordonnées),  $\mathbf{r}_\alpha$  est la position de l'atome  $\alpha$ ,  $\hat{V}$  est un potentiel quelconque n'agissant pas sur la dynamique interne des atomes et où  $\hat{\mathbb{1}}_\alpha^{\text{ext}}$  est l'opérateur identité dans l'espace d'Hilbert des fonctions d'onde décrivant le mouvement global des atomes. L'état global du système est donné par

$$\langle \mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b | \psi(t) \rangle = \sum_{i,j=\pm} \psi_{ij}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, t) |\chi_{ij}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)\rangle \quad (5.6)$$

où les fonctions d'onde  $\psi_{ij}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, t)$  décrivent le mouvement global des atomes.

Supposons que les atomes se trouvent initialement dans l'état propre interne  $|\chi_{ij}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)\rangle = |\chi_i(\mathbf{r}_a)\rangle \otimes |\chi_j(\mathbf{r}_b)\rangle$  et se déplacent suffisamment lentement pour être dans les conditions d'applicabilité du théorème adiabatique. Dans ce cas, le système reste dans l'état interne séparable  $|\chi_{ij}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)\rangle$  et l'état global du système est  $\langle \mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b | \psi(t) \rangle \approx \psi_{ij}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, t) |\chi_{ij}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)\rangle$ . En injectant cette expression dans l'équation de Schrödinger avec l'hamiltonien (5.5) et en projetant sur l'état  $|\chi_{ij}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)\rangle$ , nous obtenons

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{ij}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, t) = \left( \frac{(\hat{\mathbf{P}}_a - \mathbf{A}_a^{(i)})^2}{2m_a} + \frac{(\hat{\mathbf{P}}_b - \mathbf{A}_b^{(j)})^2}{2m_b} + \phi_a^{(i)} + \phi_b^{(j)} + \hat{V} + E_{ij} \right) \psi_{ij}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, t) \quad (5.7)$$

avec les potentiels de jauge artificiels

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_a^{(i)}(\mathbf{r}_a) &= i\hbar \langle \chi_{ij} | \nabla_{\mathbf{r}_a} \chi_{ij} \rangle = i\hbar \langle \chi_i | \nabla_{\mathbf{r}_a} \chi_i \rangle_a \\ \mathbf{A}_b^{(j)}(\mathbf{r}_b) &= i\hbar \langle \chi_{ij} | \nabla_{\mathbf{r}_b} \chi_{ij} \rangle = i\hbar \langle \chi_j | \nabla_{\mathbf{r}_b} \chi_j \rangle_b \\ \phi_a^{(i)}(\mathbf{r}_a) &= \frac{\hbar^2}{2m_a} \sum_{kl \neq ij} |\langle \chi_{kl} | \nabla_{\mathbf{r}_a} \chi_{ij} \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m_a} \sum_{k \neq i} |\langle \chi_k | \nabla_{\mathbf{r}_a} \chi_i \rangle_a|^2 \\ \phi_b^{(j)}(\mathbf{r}_b) &= \frac{\hbar^2}{2m_b} \sum_{kl \neq ij} |\langle \chi_{kl} | \nabla_{\mathbf{r}_b} \chi_{ij} \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m_b} \sum_{l \neq j} |\langle \chi_l | \nabla_{\mathbf{r}_b} \chi_j \rangle_b|^2 \end{aligned} \quad (5.8)$$

où  $i, j, k, l = \pm$ . Remarquons que pour deux atomes indépendants, les potentiels de jauge artificiels (5.8) sont identiques à ceux obtenus pour un seul atome. Ces potentiels de jauge artificiels sont donnés explicitement par l'expression (4.14) évaluée à la position  $\mathbf{r}_\alpha$  de l'atome  $\alpha$ . Les champs magnétiques artificiels sont quant à eux donnés par l'expression

$$\mathbf{B}_\alpha = \nabla_{\mathbf{r}_\alpha} \times \mathbf{A}_\alpha(\mathbf{r}_\alpha). \quad (5.9)$$

Dans le cas de deux atomes indépendants, les champs magnétiques artificiels sont donnés par l'équation (4.15) évaluée à la position  $\mathbf{r}_\alpha$  de l'atome  $\alpha$ . Dans la situation particulière où deux atomes sont soumis à un champ laser se propageant dans la direction  $\mathbf{e}_x$  de désaccord en fréquence constant et homogène ( $\delta_a = \delta_b = \delta$ ), mais dont la fréquence de Rabi présente un profil gaussien dans la direction  $\mathbf{e}_y$ , les deux atomes ressentent, en fonction de l'état interne dans lequel ils se trouvent, un champ magnétique artificiel dirigé dans la direction  $\mathbf{e}_z$  dont l'intensité est donnée par l'expression (4.18) évaluée en  $\mathbf{r}_\alpha$ .

## Chapitre 6

# Interactions dipolaires électriques entre deux atomes

Comme nous venons de le voir au chapitre précédent, les champs de jauge artificiels générés par l'évolution adiabatique de systèmes à deux atomes indépendants plongés dans des champs lasers sont identiques à ceux obtenus en ne considérant qu'un seul atome. En réalité, les atomes ne sont jamais totalement indépendants et interagissent entre eux. L'objet du chapitre 7 est d'étudier l'influence des interactions entre atomes sur les potentiels de jauge artificiels. Dans ce but, nous allons nous focaliser sur les interactions dipolaires électriques entre atomes et plus particulièrement lorsque ceux-ci sont dans des états de Rydberg. L'expression du décalage en énergie des états de Rydberg provenant des interactions dipolaires entre atomes fait l'objet de la section 6.1. Dans la section 6.2, nous discutons du phénomène de blocage dipolaire dans le cas de deux atomes à deux niveaux et nous proposons un hamiltonien effectif permettant d'en rendre compte.

### 6.1 Interaction dipolaire entre atomes de Rydberg

Un état de Rydberg est un état atomique de nombre quantique principal  $n$  très élevé (typiquement  $n \approx 50$ ). Nous considérons un système composé de deux atomes identiques à deux niveaux dont l'état excité est un état de Rydberg. De part l'éloignement important de l'électron excité par rapport au noyau, les états de Rydberg ont l'avantage de présenter des moments dipolaires électriques importants. La taille d'un atome dans un état de Rydberg est de l'ordre de  $n^2 a_0$  où  $n$  est le nombre quantique principal de l'état de Rydberg et où  $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$  est le rayon de Bohr ( $n^2 a_0 \approx 1 \mu\text{m}$  pour  $n \approx 50$ ) [42]. Dans la suite, nous considérons des distances interatomiques d'un ordre de grandeur supérieur à la taille des atomes de Rydberg de manière à éviter le recouvrement des fonctions d'onde des électrons des deux atomes. Dans cette situation, l'interaction dipolaire électrique constitue l'interaction dominante entre atomes [42].

L'opérateur associé au potentiel d'interaction dipolaire électrique entre deux atomes  $a$  et  $b$  est donné par [42–44]

$$\hat{V}_{\text{d-d}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{\hat{\mathbf{d}}_a \cdot \hat{\mathbf{d}}_b}{|\hat{\mathbf{r}}_{ab}|^3} - \frac{(\hat{\mathbf{d}}_a \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ab})(\hat{\mathbf{d}}_b \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ab})}{3|\hat{\mathbf{r}}_{ab}|^5} \right) \quad (6.1)$$

avec  $\mathbf{r}_{ab} = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b$  la distance entre atomes,  $\hat{\mathbf{d}}_\alpha = e\hat{\mathbf{r}}_\alpha$  ( $\alpha = a, b$ ) l'opérateur moment dipolaire électrique de l'atome  $\alpha$  avec  $e < 0$  la charge de l'électron et  $\hat{\mathbf{r}}_\alpha$  l'opérateur position de l'électron excité vers un état de Rydberg par rapport au noyau de l'atome auquel il appartient. Ce potentiel d'interaction a pour effet de décaler les niveaux d'énergie du système à deux atomes. Nous considérons ici une situation où les deux atomes sont soumis à un seul champ laser capable de les exciter vers un même état de Rydberg. Dans ce cas, lorsque les atomes sont suffisamment éloignés afin de pouvoir négliger

l'interaction dipolaire, l'état du système doublement excité est de la forme  $|n, l, j, m_j\rangle_a \otimes |n, l, j, m_j\rangle_b$  où les différents états  $|n, l, j, m_j\rangle$  sont les états internes de structure fine d'un atome isolé et peuvent être calculés par la théorie des défauts quantiques [42]. Le potentiel d'interaction  $\hat{V}_{d-d}$  a pour effet d'induire des transitions entre l'état  $|n, l, j, m_j\rangle_a \otimes |n, l, j, m_j\rangle_b$  et d'autres états excités à deux atomes. Bien qu'une infinité de transitions soient possibles, en pratique, quelques-unes seulement contribuent de manière significative au décalage des niveaux d'énergie [42, 44].

Considérons le cas où seuls les états  $|n, l, j, m_j\rangle_a \otimes |n, l, j, m_j\rangle_b$ ,  $|n', l', j', m'_j\rangle_a \otimes |n'', l'', j'', m''_j\rangle_b$  et  $|n'', l'', j'', m''_j\rangle_a \otimes |n', l', j', m'_j\rangle_b$  avec un défaut d'énergie  $\Delta = E_{n'l'j'} + E_{n''l''j''} - 2E_{nlj}$  contribuent<sup>1</sup>. Ces niveaux d'énergie, ainsi que les transitions possibles, sont représentés sur la figure 6.1. Le but étant

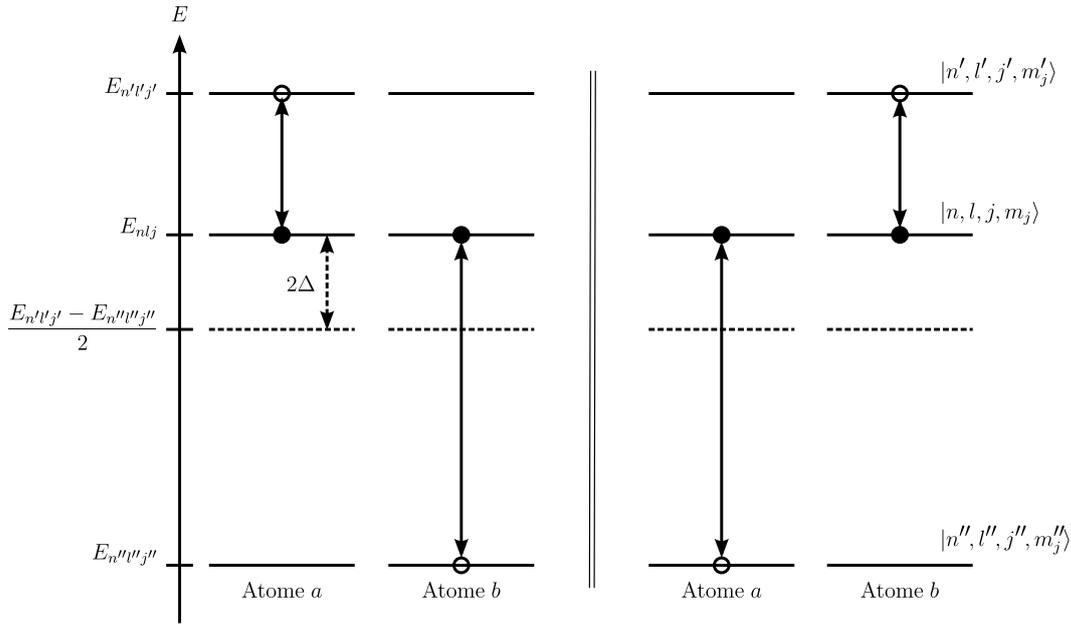


FIGURE 6.1 – Structure des niveaux d'énergie des états de Rydberg  $|n, l, j, m_j\rangle$ ,  $|n', l', j', m'_j\rangle$  et  $|n'', l'', j'', m''_j\rangle$ . Si le défaut en énergie  $\Delta$  est faible, seules les transitions  $|n, l, j, m_j\rangle_a \otimes |n, l, j, m_j\rangle_b \leftrightarrow |n', l', j', m'_j\rangle_a \otimes |n'', l'', j'', m''_j\rangle_b$  et  $|n, l, j, m_j\rangle_a \otimes |n, l, j, m_j\rangle_b \leftrightarrow |n'', l'', j'', m''_j\rangle_a \otimes |n', l', j', m'_j\rangle_b$  contribuent de manière significative.

de calculer le décalage en énergie  $\hbar V$  de l'état doublement excité dû à l'interaction avec les niveaux voisins, nous ne discuterons pas du transfert de population entre les différents états de Rydberg. Afin de calculer ce décalage en énergie, il est nécessaire d'évaluer tous les éléments de matrice  $\langle A | \hat{V}_{d-d} | B \rangle$  avec  $|A\rangle$  et  $|B\rangle$  choisis parmi les trois états à deux atomes considérés [42, 43]. Le décalage en énergie est donné par les valeurs propres de la matrice  $3 \times 3$  ainsi obtenue et présente deux régimes distincts. Lorsque le défaut d'énergie  $\Delta$  est grand, le système est dans le régime de van der Waals caractérisé par un décalage en énergie [42, 43]

$$\hbar V_{\text{vdW}}(r_{ab}) = \hbar \frac{C_6}{r_{ab}^6} \quad (6.2)$$

où  $C_6$  est une constante réelle. Notons que ce résultat peut être obtenu en utilisant la théorie des perturbations au second ordre [44]. Dans le cas où le défaut d'énergie  $\Delta$  est nul, le système se trouve

1. Les états avec un défaut d'énergie faible contribuent majoritairement au décalage en énergie [44]. Si la transition  $nlj + nlj \leftrightarrow n'l'j' + n''l''j''$  est quasi-résonante, les états du type  $|n, l, j, m_j\rangle_a \otimes |n', l', j', m'_j\rangle_b$  auront un grand défaut d'énergie et contribueront donc de manière négligeable.

à la résonance de Förster [42, 44]. Dans cette situation, le décalage en énergie est donné par

$$\hbar V_F(r_{ab}) = \hbar \frac{C_3}{r_{ab}^3} \quad (6.3)$$

où  $C_3$  est une constante réelle. Cette constante peut être positive ou négative. Dans la suite, nous choisirons toujours  $C_3 > 0$ . Lorsque le défaut en énergie est faible mais pas strictement nul, la dépendance du décalage en énergie en fonction de la distance entre atomes n'est pas une simple loi de puissance. La distance critique  $R_c$  séparant les régimes de van der Waals et de Förster s'obtient en égalant le décalage en énergie du niveau doublement excité au défaut d'énergie, soit  $\Delta = \hbar V_F(R_c) = \hbar C_3/R_c^3$ . Pour  $r_{ab} \gg R_c$ , le décalage en énergie est donné par  $\hbar V_{vdW}(r_{ab})$  et la situation est identique au cas où le défaut en énergie est grand. Dans la limite  $r_{ab} \ll R_c$ , le décalage en énergie est donné par l'expression (6.3). L'intervalle de distance dans lequel cette limite est valide est d'autant plus grand que le défaut en énergie est faible [42, 43].

En appliquant un faible champ électrique, les états de Rydberg vont voir leurs énergies modifiées suite à l'effet Stark. Ce déplacement des niveaux d'énergie peut être utilisé pour modifier le défaut d'énergie afin de faire passer le système à deux atomes de la résonance de Förster au régime de van der Waals et inversement [42, 44]. Il est également possible de conférer à certains états de Rydberg un moment dipolaire électrique permanent par application d'un champ électrique. Le décalage en énergie s'obtient en calculant  ${}_b\langle n, l, j, m_j | \otimes {}_a\langle n, l, j, m_j | \hat{V}_{d-a} | n, l, j, m_j \rangle_a \otimes | n, l, j, m_j \rangle_b$  et se comporte dans ce cas toujours en  $1/r_{ab}^3$  [44].

## 6.2 Blocage dipolaire

Le décalage en énergie du niveau doublement excité du système à deux atomes a pour conséquence de réduire partiellement ou totalement le peuplement de cet état. En effet, considérons la situation dans laquelle les deux atomes, qui possèdent chacun deux niveaux  $|e\rangle$  et  $|g\rangle$ , sont plongés dans le même champ laser de pulsation  $\omega_L$ . Si le désaccord en fréquence  $\delta = \omega_L - \omega$  où  $\hbar\omega = E_e - E_g$  est faible, le laser induit des oscillations de Rabi entre les états  $|e\rangle$  et  $|g\rangle$  des atomes considérés individuellement. Cependant, l'interaction dipolaire électrique entre atomes entraîne un décalage en énergie du niveau  $|ee\rangle$ . Si ce décalage est suffisamment grand, la transition entre le niveau simplement excité  $|eg\rangle$  (ou  $|ge\rangle$ ) et  $|ee\rangle$  est non-résonante (voir figure 6.2) et l'état doublement excité n'est jamais peuplé. Ce phénomène porte le nom de blocage dipolaire ou de blocage de Rydberg et a été récemment mis en évidence expérimentalement avec des atomes de rubidium 87 [42, 43].

Comme le phénomène de blocage de dipolaire provient du décalage en énergie de l'état  $|ee\rangle$ , nous pouvons modéliser ce phénomène en ajoutant un terme supplémentaire  $\hbar V(r_{ab})|ee\rangle\langle ee|$  à l'hamiltonien (5.2) décrivant deux atomes indépendants en interaction avec un même champ laser. Nous obtenons ainsi l'hamiltonien  $\hat{H}_{bd} = \hat{H}_{ind} + \hbar V(r_{ab})|ee\rangle\langle ee|$  où le décalage en énergie  $\hbar V(r_{ab})$  est donné par les expressions (6.2) ou (6.3) en fonction du régime dans lequel se trouve le système<sup>2</sup> [42, 45]. Dans la suite, nous considérons systématiquement des atomes à la résonance de Förster car ce régime donne lieu à des décalages en énergie du niveau  $|ee\rangle$  plus importants que dans le régime de van der Waals. Nous envisageons ici la situation où le désaccord en fréquence  $\delta$  et la fréquence de Rabi  $\Omega$  sont homogènes et identiques pour les deux atomes. Les niveaux d'énergie d'un tel système sont représentés sur la figure 6.2. Dans la base des états à deux atomes non couplés  $\{|ee\rangle, |eg\rangle, |ge\rangle, |gg\rangle\}$ , nous avons

$$\hat{H}_{bd} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 2V - 2\delta & \Omega e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_b} & \Omega e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_a} & 0 \\ \Omega^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_b} & 0 & 0 & \Omega e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_a} \\ \Omega^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_a} & 0 & 0 & \Omega e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_b} \\ 0 & \Omega^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_a} & \Omega^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_b} & 2\delta \end{pmatrix}. \quad (6.4)$$

2. Par la suite, la dépendance du décalage en énergie du niveau doublement excité par rapport à la distance entre atomes sera sous-entendue afin d'alléger les notations.

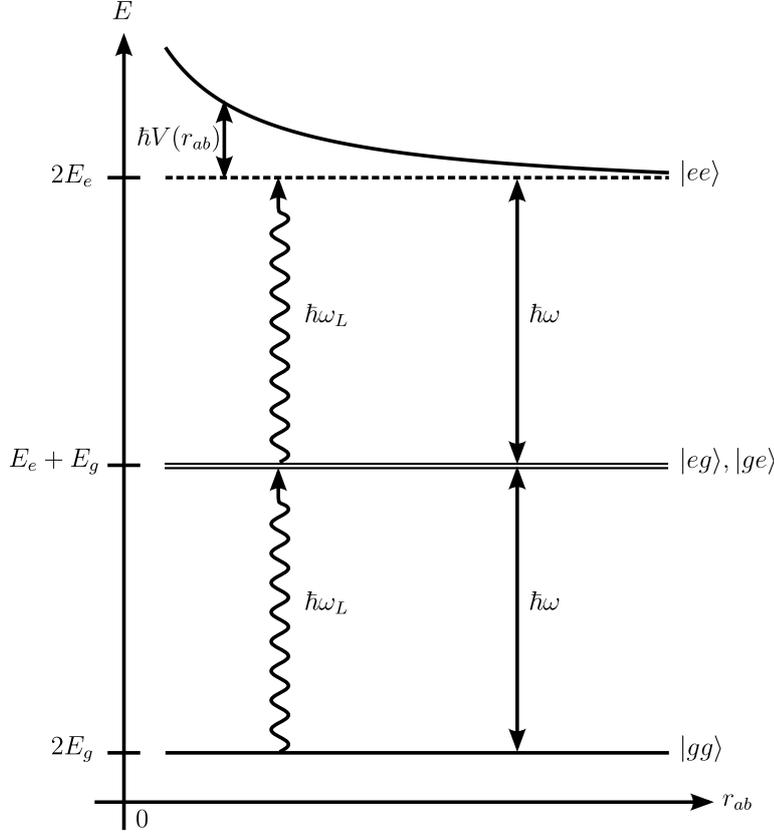


FIGURE 6.2 – Structure des niveaux d'énergie d'un système de deux atomes en régime de blocage dipolaire. Sous l'effet de l'interaction dipolaire entre atomes, le niveau doublement excité voit son énergie modifiée d'une valeur  $\hbar V(r_{ab})$  où  $r_{ab}$  est la distance entre atomes.

Introduisons les états à une excitation

$$|\psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_a} |eg\rangle \pm e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_b} |ge\rangle). \quad (6.5)$$

Dans la base  $\{|\psi_{-}\rangle, |ee\rangle, |\psi_{+}\rangle, |gg\rangle\}$ , l'hamiltonien devient

$$\hat{H}_{\text{bd}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2V - 2\delta & \sqrt{2}\Omega e^{i\mathbf{k}_L \cdot (\mathbf{r}_a + \mathbf{r}_b)} & 0 \\ 0 & \sqrt{2}\Omega^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot (\mathbf{r}_a + \mathbf{r}_b)} & 0 & \sqrt{2}\Omega \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\Omega^* & 2\delta \end{pmatrix} \quad (6.6)$$

ce qui montre que l'état  $|\psi_{-}\rangle$  est un état propre de  $\hat{H}_{\text{bd}}$  de valeur propre nulle. Si le système ne contient initialement aucune composante sur l'état  $|\psi_{-}\rangle$ , il ne peuplera jamais cet état au cours de son évolution temporelle. De plus, en régime de blocage dipolaire, l'état  $|ee\rangle$  n'est jamais peuplé et la dynamique du système se ramène à celle d'un système à deux niveaux composé des états  $\{|\psi_{+}\rangle, |gg\rangle\}$  avec une fréquence de Rabi augmentée d'un facteur  $\sqrt{2}$ . Remarquons que comme l'état  $|\psi_{+}\rangle$  est intriqué, le mécanisme de blocage dipolaire permet de produire expérimentalement des états intriqués [43, 46].

En régime de blocage dipolaire, il est intéressant d'éliminer le niveau  $|ee\rangle$  de l'hamiltonien afin d'obtenir un hamiltonien effectif à trois niveaux. Comme nous le verrons plus tard, il est important

de travailler dans le sous-espace sous-tendu par les états  $\{|\psi_-\rangle, |\psi_+\rangle, |gg\rangle\}$  bien que l'état  $|\psi_-\rangle$  soit à priori découplé de la dynamique du système. Comme  $|\psi_-\rangle$  est un état propre de l'hamiltonien  $\hat{H}_{\text{bd}}$ , l'étude de la dynamique du système à deux atomes se ramène à la détermination des vecteurs et valeurs propres d'un système à deux niveaux. Procédons, dans ce but, à l'élimination adiabatique de l'état  $|ee\rangle$  au moyen de la méthode proposée par V. Paulisch *et al.* à l'ordre zéro [47]. Cette méthode consiste à écrire l'état du système sous la forme  $|\psi(t)\rangle = c_{ee}(t)|ee\rangle + c_{eg}(t)|eg\rangle + c_{ge}(t)|ge\rangle + c_{gg}(t)|gg\rangle$  et à injecter cette expression dans l'équation de Schrödinger afin d'obtenir un système de quatre équations différentielles du premier ordre couplées pour les coefficients  $c_{ij}(t)$  ( $i, j = e, g$ ). En intégrant l'équation contenant la dérivée de  $c_{ee}(t)$  par rapport au temps avec la condition initiale  $c_{ee}(0) = 0$ , nous obtenons une expression exacte pour  $c_{ee}(t)$  sous forme intégrale en fonction des trois autres coefficients. Dans l'approximation de Markov, qui revient à négliger les effets de mémoire et qui est valable lorsque les coefficients  $c_{ij}(t)$  avec  $ij \neq ee$  oscillent lentement par rapport à  $\exp(-iVt)$ , il est justifié de sortir ces coefficients de l'intégrale qui devient ainsi triviale à calculer. Cette approximation, valable pour autant que  $|\Omega|, |\delta| \ll |V|$ , fournit une expression pour  $c_{ee}(t)$  en fonction des trois autres coefficients. En injectant l'expression de  $c_{ee}(t)$  ainsi obtenue dans les trois équations différentielles pour les coefficients  $c_{ij}(t)$  ( $i, j \neq ee$ ), nous aboutissons à un système d'équation décrivant l'évolution de l'état du système à partir duquel il est possible de reconstruire l'hamiltonien effectif [47]. Cette méthode est adaptée au cas d'un hamiltonien en schéma d'interaction indépendant du temps. Cependant, un tel hamiltonien n'est pas unique et l'ajout d'un terme du type  $C\hat{1}^{\text{int}}$  où  $C$  est une constante quelconque et  $\hat{1}^{\text{int}}$  est l'opérateur identité dans l'espace des états internes donne un hamiltonien décrivant la même situation mais pouvant conduire à un hamiltonien effectif sensiblement différent<sup>3</sup>. Plusieurs critères permettent de déterminer la constante  $C$  à choisir [47] afin d'étendre au maximum le domaine de validité de l'hamiltonien effectif. Par soucis de simplicité, nous avons choisi d'imposer la condition  $\text{Tr}(\hat{H}' + C\hat{1}_3) = 0$  où  $\hat{1}_3$  est l'opérateur identité dans le sous-espace des états internes  $\{|eg\rangle, |ge\rangle, |gg\rangle\}$  et  $\hat{H}'$  est la restriction de l'hamiltonien (6.4) aux états  $|eg\rangle, |ge\rangle$  et  $|gg\rangle$ . Cette condition donne  $C = -\hbar\delta/3$  et après élimination de l'état doublement excité  $|ee\rangle$ , nous obtenons, dans la base  $\{|eg\rangle, |ge\rangle, |gg\rangle\}$ , l'hamiltonien effectif

$$\hat{H}_{\text{bd-eff}} = \hbar \begin{pmatrix} -\frac{\delta}{3} - \Gamma & -\Gamma e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_{ab}} & \frac{\Omega}{2} e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_a} \\ -\Gamma e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_{ab}} & -\frac{\delta}{3} - \Gamma & \frac{\Omega}{2} e^{i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_b} \\ \frac{\Omega}{2}^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_a} & \frac{\Omega}{2}^* e^{-i\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r}_b} & \frac{2\delta}{3} \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

où  $\Gamma = |\Omega|^2/(4V - 16\delta/3)$ . Définissons la distance critique  $r_c$  telle que  $V(r_c) = \max(|\delta|, |\Omega|)$  où  $V(r_{ab})$  est donné par l'équation (6.3), c'est-à-dire

$$r_c = \sqrt[3]{\frac{C_3}{\max(|\delta|, |\Omega|)}}. \quad (6.8)$$

Cette distance correspond à la distance interatomique maximale pour laquelle l'hamiltonien effectif  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$  décrit correctement la dynamique du système. Afin de fixer les ordres de grandeur, considérons la situation où le désaccord en fréquence est nul, la fréquence de Rabi  $\Omega/2\pi = 6.5$  MHz et où la constante  $C_3/2\pi$  apparaissant dans le décalage en énergie du niveau doublement excité vaut  $3200$   $\text{MHz} \cdot \mu\text{m}^3$  [43]. À ces paramètres correspond une distance critique  $r_c \approx 8 \mu\text{m}$ .

L'état  $|\psi_-\rangle$  (noté par la suite  $|\chi_0\rangle$ ) reste toujours état propre de l'hamiltonien effectif, mais d'énergie propre  $E_0 = -\hbar\delta/3$ . Les deux autres états propres de  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$  sont

$$|\chi_{\pm}\rangle = \frac{e^{i\alpha}(-8\delta^2 + 6\delta V + 3|\Omega|^2 \mp \sqrt{\eta})|\psi_+\rangle + 2\sqrt{2}(4\delta - 3V)|\Omega||gg\rangle}{\sqrt{8(4\delta - 3V)^2|\Omega|^2 + (-8\delta^2 + 6\delta V + 3|\Omega|^2 \mp \sqrt{\eta})^2}} \quad (6.9)$$

de valeurs propres

$$E_{\pm} = \frac{\hbar(8\delta^2 - 6\delta V + 9|\Omega|^2 \mp 3\sqrt{\eta})}{12(4\delta - 3V)} \quad (6.10)$$

3. L'ajout d'un tel terme revient à redéfinir le zéro d'énergie.

avec  $\eta = (8\delta^2 + |\Omega|^2)(8\delta^2 + 9|\Omega|^2) + 12V[-8\delta^3 - 13\delta|\Omega|^2 + 3V(\delta^2 + 2|\Omega|^2)]$ . Lorsque le désaccord en fréquence  $\delta$  est nul, les vecteurs propres  $|\chi_{\pm}\rangle$  sont donnés par

$$|\chi_{\pm}\rangle = \frac{1}{4V} \sqrt{1 \pm \frac{|\Omega|}{\sqrt{|\Omega|^2 + 8V^2}}} \left[ e^{i\alpha} \left( -|\Omega| \pm \sqrt{|\Omega|^2 + 8V^2} \right) |\psi_{+}\rangle + 2\sqrt{2}V |gg\rangle \right] \quad (6.11)$$

et ont pour énergies propres

$$E_{\pm} = \frac{\hbar|\Omega|^2}{4V} \left( -1 \pm \sqrt{1 + \frac{8V^2}{|\Omega|^2}} \right) \quad (6.12)$$

où  $\Omega = |\Omega|e^{i\alpha}$ . Remarquons qu'en régime de blocage dipolaire, tous les états propres de  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$  sont complètement symétriques ou complètement antisymétriques par rapport à l'échange de particules.

## Chapitre 7

# Champs de jauge artificiels pour deux atomes avec interactions dipolaires

Ce chapitre est dédié au calcul des potentiels de jauge artificiels d'un système de deux atomes en interaction dipolaire électrique. La section 7.1 est consacrée à l'étude des potentiels et champs de jauge en régime de blocage dipolaire. Le cas général, où les états propres de l'hamiltonien  $\hat{H}_{\text{bd}}$  sont considérés, fait l'objet de la section 7.2. Dans un premier temps, le désaccord en fréquence est choisi nul afin de simplifier les expressions des différents potentiels et champs de jauge artificiels. Dans un second temps, l'effet du désaccord en fréquence est étudié. Les potentiels et champs de jauge artificiels sont représentés dans la suite en fonction de la distance interatomique  $r_{ab}$ . Les figures peuvent notamment être interprétées comme les potentiels et champs ressentis par un atome suite à son interaction avec l'autre atome maintenu fixe à l'origine du système de référence. Dans ce chapitre, tous les graphiques ont été tracés pour les paramètres issus de l'expérience de A. Gaëtan *et al.* [43] :  $|\Omega|/2\pi = 6.5$  Mhz,  $\lambda_L = 296$  nm,  $m = 85.57$  u.m.a. et  $C_3/2\pi = 3200$  Mhz. $\mu\text{m}^3$ .

## 7.1 Régime de blocage dipolaire

### 7.1.1 Désaccord en fréquence nul

#### Potentiels et champs de jauge artificiels

Déterminons les potentiels de jauge artificiels ressentis par deux atomes en interaction dont la dynamique est décrite par l'hamiltonien interne (6.7) et suivant adiabatiquement un état propre (6.11) de cet hamiltonien. Pour un désaccord en fréquence nul et une fréquence de Rabi homogène et constante, les potentiels de jauge, en l'absence d'interaction entre atomes, sont constants et conduisent à des champs électromagnétiques artificiels nuls. L'hamiltonien décrivant le mouvement global et la dynamique interne des atomes est de la forme (5.5) où  $\hat{H}_{\text{ind}}$  est remplacé par  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$ . L'état global du système peut s'écrire sous la forme

$$\langle \mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b | \psi(t) \rangle = \sum_{i=0,\pm} \psi_i(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, t) |\chi_i(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)\rangle. \quad (7.1)$$

où les états internes  $|\chi_{\pm}\rangle$  sont donnés par (6.11) et  $|\chi_0\rangle \equiv |\psi_-\rangle$ . Lorsque le système suit adiabatiquement un des états propres internes  $|\chi_i\rangle$ , son état est donné à tout instant par  $\langle \mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b | \psi(t) \rangle \approx \psi_i(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, t) |\chi_i(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)\rangle$  et des développements similaires à ceux du chapitre 5 nous conduisent à une équation de Schrödinger effective pour la fonction d'onde  $\psi_i(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, t)$  décrivant le mouvement des

atomes de la forme de l'équation (5.7) avec les potentiels de jauge artificiels

$$\mathbf{A}_\alpha^{(\pm)}(\mathbf{r}_\alpha) = i\hbar\langle\chi_\pm|\nabla_{\mathbf{r}_\alpha}\chi_\pm\rangle = \frac{\hbar\mathbf{k}_L}{4} \left( -1 \pm \frac{|\Omega|}{\sqrt{|\Omega|^2 + 8V^2(r_{ab})}} \right)$$

$$\phi_\alpha^{(\pm)}(\mathbf{r}_\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m} (|\langle\chi_\mp|\nabla_{\mathbf{r}_\alpha}\chi_\pm\rangle|^2 + |\langle\chi_0|\nabla_{\mathbf{r}_\alpha}\chi_\pm\rangle|^2) \quad (7.2)$$

$$= \frac{\hbar^2}{m} \left[ \frac{|\mathbf{k}_L|^2}{16} \left( 1 \mp \frac{|\Omega|}{\sqrt{|\Omega|^2 + 8V^2(r_{ab})}} \right)^2 + \frac{|\mathbf{k}_L|^2 V^2(r_{ab})}{4[|\Omega|^2 + 8V^2(r_{ab})]} + \frac{|\Omega|^2 |\nabla_{\mathbf{r}_\alpha} V(r_{ab})|^2}{[|\Omega|^2 + 8V^2(r_{ab})]^2} \right]$$

où  $\alpha = a, b$  et  $r_{ab} = |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|$  correspond à la distance entre atomes. Remarquons que les potentiels vecteurs et scalaires sont identiques pour les deux atomes car leur dépendance spatiale n'apparaît que dans le décalage en énergie  $\hbar V$  du niveau doublement excité  $|ee\rangle$  au travers de la distance interatomique. Ces potentiels de jauge sont représentés sur la figure 7.1. Nous voyons que les potentiels de

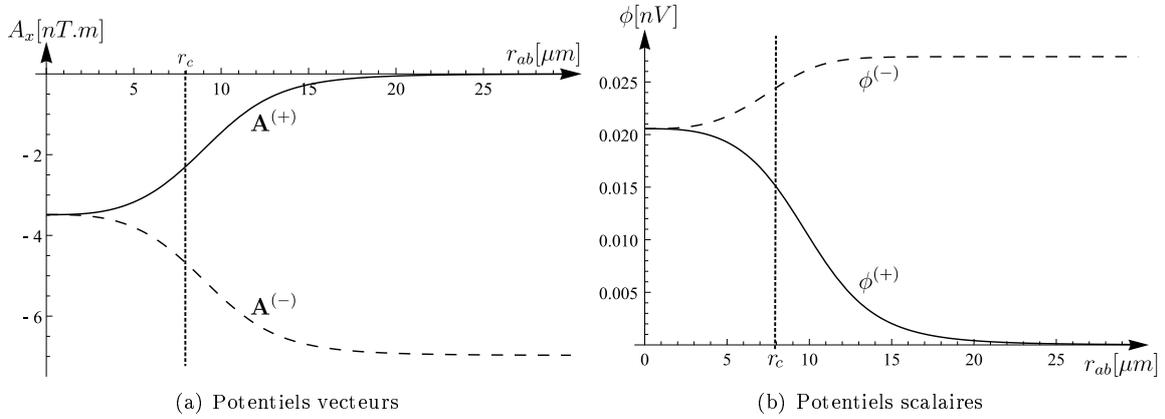


FIGURE 7.1 – Potentiels de jauge artificiels pour  $\mathbf{k}_L = (k_L, 0, 0)$ ,  $\delta = 0$  et  $|\Omega|$  constant. (a) Composante selon  $\mathbf{e}_x$  des potentiels vecteurs  $\mathbf{A}_\alpha^{(\pm)}$  (unique composante non nulle) en fonction de la distance interatomique. (b) Potentiels scalaires  $\phi_\alpha^{(\pm)}$  en fonction de la distance entre atomes. La distance critique  $r_c$ , donnée par l'équation (6.8), est représentée sur les graphiques.

jauge varient essentiellement dans la région où la distance entre atomes est telle que  $V(r_{ab}) \approx |\Omega|$ . Dans cette région, le système n'est plus en régime de blocage dipolaire et l'hamiltonien effectif (6.7) ne décrit plus correctement la dynamique du système. La forme des potentiels de jauge artificiels ne varie pas qualitativement avec la fréquence de Rabi quantifiant l'intensité du laser. Le module de la fréquence de rabi détermine néanmoins l'intervalle de distance entre les deux atomes dans lequel les potentiels de jauge varient de manière appréciable. Lorsque  $|\Omega|$  augmente, la distance entre atomes à partir de laquelle les potentiels commencent à varier sensiblement diminue. De plus, l'intervalle de variation des potentiels devient de plus en plus étroit. Ce comportement est illustré sur la figure 7.2 dans le cas du potentiel vecteur  $\mathbf{A}_a^{(+)}$ .

Lorsque le système suit l'état interne  $|\chi_0\rangle$ , nous obtenons les potentiels de jauge artificiels homogènes

$$\mathbf{A}_\alpha^{(0)}(\mathbf{r}_\alpha) = -\frac{\hbar\mathbf{k}_L}{2}, \quad \phi_\alpha^{(0)}(\mathbf{r}_\alpha) = \frac{\hbar^2|\mathbf{k}_L|^2}{8m} \quad (7.3)$$

donnant lieu à des champs magnétique et électrique artificiels nuls. En effet, l'état  $|\chi_0\rangle$  ne fait pas intervenir  $V(r_{ab})$  et est également état propre de l'hamiltonien  $\hat{H}_{\text{ind}}$  (éq. (5.2)) dans le cas où le désaccord en fréquence et la fréquence de Rabi perçus par les deux atomes sont identiques. Comme le calcul du potentiel scalaire artificiel fait intervenir les projections de  $|\nabla_{\mathbf{r}_\alpha}\chi_0\rangle$  sur le sous-espace orthogonal à  $|\chi_0\rangle$  et étant donné que les vecteurs de ce sous-espace peuvent s'écrire de manière équivalente en

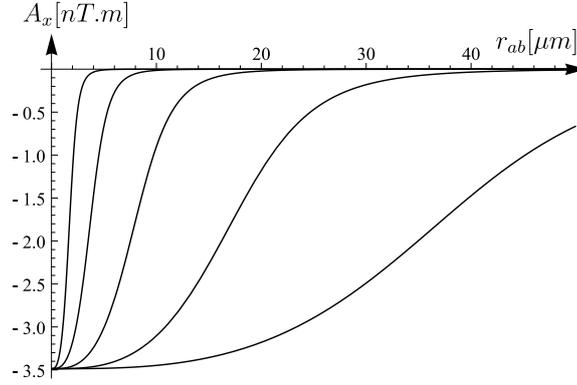


FIGURE 7.2 – Potentiel vecteur artificiel  $\mathbf{A}_a^{(+)}$  en fonction de la distance entre les deux atomes pour différentes valeurs de la fréquence de Rabi (de gauche à droite  $|\Omega|/2\pi = 1000, 100, 10, 1, 0.1$  MHz).

fonction des états propres de  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$  ou de l'hamiltonien  $\hat{H}_{\text{ind}}$  de deux atomes indépendants, il est logique que les potentiels de jauge artificiels associés à l'état  $|\chi_0\rangle$  ne dépendent pas de l'interaction entre atomes.

Les champs magnétiques artificiels obtenus à partir des potentiels vecteurs artificiels (7.2) valent

$$\mathbf{B}_\alpha^{(\pm)} = \pm 2\hbar \frac{|\Omega|V(r_{ab})}{(|\Omega|^2 + 8V^2(r_{ab}))^{3/2}} \mathbf{k}_L \times \nabla_{\mathbf{r}_\alpha} V(r_{ab}). \quad (7.4)$$

Ces champs magnétiques artificiels sont toujours orthogonaux au vecteur d'onde du laser. Choisissons un système de référence tel que  $\mathbf{k}_L = (k_L, 0, 0)$  et dans lequel l'atome  $b$  se trouve à l'origine. En utilisant les coordonnées sphériques  $(r_a, \theta, \phi)$  avec

$$\begin{cases} x = r_a \cos \theta \\ y = r_a \sin \theta \cos \phi \\ z = r_a \sin \theta \sin \phi \end{cases} \quad (7.5)$$

où  $r_a$  est la distance de l'atome  $a$  par rapport à l'origine du système de référence et  $\theta$  est l'angle entre la direction  $\mathbf{e}_x$  et le vecteur  $\mathbf{r}_a$ . Le gradient<sup>1</sup> de  $V(r_{ab}) \equiv V(r_a)$  s'écrit

$$\nabla_{\mathbf{r}_a} V(r_{ab}) = \frac{\partial}{\partial r_a} V(r_a) \mathbf{e}_{r_a} \quad (7.6)$$

où  $\mathbf{e}_{r_a} = \mathbf{r}_a/r_a$ . Le champ magnétique artificiel agissant sur l'atome  $a$  vaut dès lors

$$\mathbf{B}_a^{(\pm)} = \pm 2\hbar \frac{|\Omega|V(r_a)}{(|\Omega|^2 + 8V^2(r_a))^{3/2}} k_L \sin \theta \frac{\partial}{\partial r_a} V(r_a) \mathbf{e}_\phi \quad (7.7)$$

ce qui correspond à un champ magnétique tournant dans le plan  $y_a - z_a$  centré autour de la position de l'atome  $b$ , comme illustré sur la figure 7.3(a). Notons que les intensités des champs magnétiques artificiels  $\mathbf{B}_a^{(\pm)}$ , illustrées sur la figure 7.3(b), sont identiques bien que ces deux champs vectoriels tournent en sens opposés dans le plan  $y_a - z_a$ . Par ailleurs, au vu de la dépendance spatiale en  $\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b$  des potentiels vecteurs, nous avons  $\mathbf{B}_b^{(\pm)} = -\mathbf{B}_a^{(\pm)}$ . Comme nous pouvions le pressentir au vu des variations spatiales des potentiels vecteurs, les champs magnétiques artificiels présentent des valeurs importantes aux alentours de  $r_{ab} = r_c$ . À ces distances, la dynamique des atomes n'est plus correctement décrite par l'hamiltonien (6.7) et les états propres (6.11) ne sont plus des états stationnaires. Il est donc nécessaire

1. En coordonnées sphériques  $(r, \theta, \phi)$ , le gradient prend la forme  $\nabla = \frac{\partial}{\partial r} \mathbf{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \mathbf{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \mathbf{e}_\phi$ .

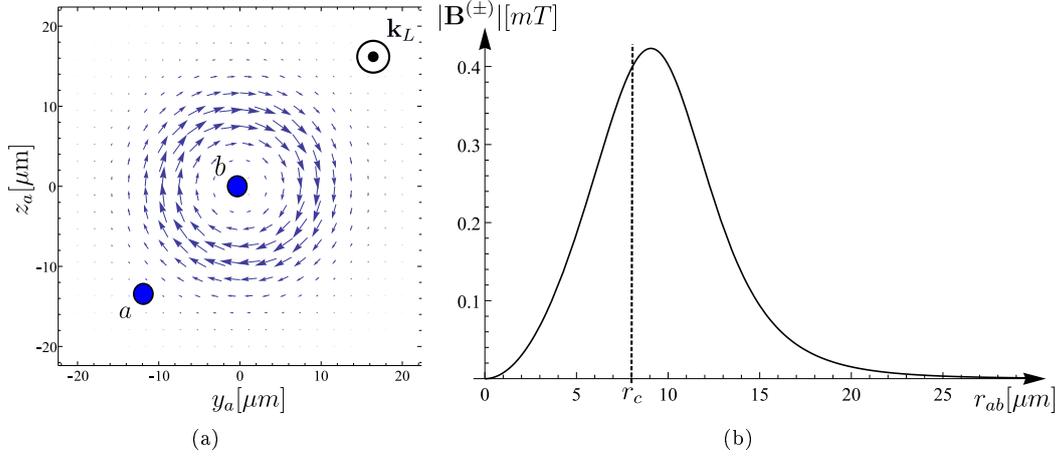


FIGURE 7.3 – Champs magnétiques artificiels dans la situation où  $\mathbf{k}_L = (k_L, 0, 0)$ . (a)  $\mathbf{B}_a^{(+)}$  dans le plan  $y_a - z_a$  ( $x_a = 0$ ). L'atome  $b$  est positionné en  $\mathbf{r}_b = \mathbf{0}$ . (b)  $|\mathbf{B}_a^{(\pm)}|$  en fonction de la distance entre atomes. La distance critique  $r_c$ , donnée par l'équation (6.8), est représentée sur le graphique.

d'utiliser l'hamiltonien (6.4) à quatre niveaux afin de déterminer rigoureusement les potentiels de jauge artificiels. Si nous avons choisi un décalage en énergie  $\hbar V(r_{ab}) < 0$ , nous aurions obtenu des potentiels et champs de jauge artificiels identiques car en l'absence de désaccord en fréquence,  $\mathbf{A}_\alpha^{(\pm)}$  et  $\phi_\alpha^{(\pm)}$  contiennent uniquement des termes en  $V^2$ .

Évaluons la dépendance spatiale des forces que ressentirait une particule classique plongée dans les potentiels de jauge artificiels donnés par l'expression (7.2). La force magnétique artificielle vaut  $\mathbf{F}_m^{(\pm)}(\mathbf{r}_\alpha) = \mathbf{v}_\alpha \times \mathbf{B}_\alpha^{(\pm)}(\mathbf{r}_\alpha)$  avec  $\mathbf{v}_\alpha$  la vitesse de l'atome  $\alpha$  et la force électrique artificielle est donnée par  $\mathbf{F}_{\text{elec}}^{(\pm)}(\mathbf{r}_\alpha) = -\nabla_{\mathbf{r}_\alpha} \phi_\alpha^{(\pm)}(\mathbf{r}_\alpha)$ . Lorsque les atomes sont en régime de blocage dipolaire et pour  $r_{ab} \ll r_c$ , nous avons

$$|\mathbf{F}_m^{(\pm)}| \propto r_{ab}^2 \quad \text{et} \quad |\mathbf{F}_{\text{elec}}^{(\pm)}| \propto \frac{1}{r_{ab}}. \quad (7.8)$$

Malgré la dépendance apparente en  $1/r_{ab}^3$  du potentiel (6.1) d'interaction dipolaire entre atomes, la dépendance spatiale (7.8) des forces ayant pour origine les potentiels de jauges artificiels est différente de celle en  $1/r_{ab}^4$  de la force classique entre dipôles électriques permanents. De plus, la force dipolaire électrique classique est radiale, ce qui n'est pas le cas de la force magnétique artificielle.

### Comparaison au cas d'atomes indépendants

Il existe des similitudes entre les potentiels de jauge artificiels établis dans le chapitre 5<sup>2</sup> et ceux (éq. (7.2)) obtenus pour deux atomes en régime de blocage dipolaire avec une fréquence de Rabi homogène et un désaccord en fréquence nul. En appliquant les substitutions  $\delta \leftrightarrow |\Omega|$  et  $|\Omega|(\mathbf{r}) \leftrightarrow 2\sqrt{2}V(r_{ab})$ , les potentiels vecteurs artificiels, donnés par les équations (4.14) et (7.2), ont la même forme à un facteur 1/2 près. Les mêmes substitutions, appliquées aux potentiels scalaires, montrent qu'ils présentent certains termes de même forme. En régime de blocage dipolaire, ils contiennent un terme supplémentaire qui provient de la projection de  $|\nabla_{\mathbf{r}_\alpha} \chi_\pm\rangle$  sur l'état  $|\chi_0\rangle$ . Bien que les potentiels de jauge artificiels aient une forme similaire dans ces deux situations, la physique sous-jacente est sensiblement différente. Dans le cas d'atomes indépendants avec  $|\Omega| = |\Omega(\mathbf{r})|$ , les potentiels de jauge découlent exclusivement des variations spatiales de la fréquence de Rabi et la dynamique des atomes reste indépendante. En

2. Ces potentiels, donnés par l'équation (4.14), résultent de l'interaction d'atomes indépendants avec un champ laser de fréquence de Rabi variable dans l'espace et de désaccord en fréquence  $\delta$  homogène.

régime de blocage dipolaire, les potentiels de jauge artificiels émergent principalement de l'interaction entre atomes et plus précisément des variations du décalage en énergie du niveau doublement excité en fonction de la distance interatomique. Dans cette situation, la dépendance spatiale de  $V(r_{ab})$  en  $1/r_{ab}^3$  est qualitativement différente du cas d'atomes indépendants où la dépendance spatiale de  $|\Omega(\mathbf{r})|$  dépend du profil du laser, typiquement gaussien. Cette différence de dépendance spatiale influence profondément les champs magnétiques artificiels. En régime de blocage dipolaire, les champs magnétiques artificiels sont des champs vectoriels tournant dans le plan orthogonal au vecteur d'onde alors que pour des atomes indépendants et un faisceau laser se propageant selon  $\mathbf{e}_x$  et de profil gaussien selon  $\mathbf{e}_y$  (c.f. chapitre 5) les champs magnétiques artificiels sont dirigés selon  $\mathbf{e}_z$ .

### Analyse dans le système du centre de masse

Analysons la situation précédemment étudiée dans le système du centre de masse. Définissons les coordonnées du centre de masse [16]

$$\begin{cases} \mathbf{R} = \frac{m_a \mathbf{r}_a + m_b \mathbf{r}_b}{m_a + m_b} \\ \mathbf{r} = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b \end{cases} \quad (7.9)$$

d'impulsions canoniquement conjuguées

$$\begin{cases} \mathbf{P} = \mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b \\ \mathbf{p} = \frac{m_b \mathbf{p}_a - m_a \mathbf{p}_b}{m_a + m_b} \end{cases} \quad (7.10)$$

où  $m_\alpha$ ,  $\mathbf{r}_\alpha$  et  $\mathbf{p}_\alpha$  sont respectivement la masse, la position et l'impulsion de l'atome  $\alpha$ . Nous considérons ici deux atomes identiques, ce qui implique  $m_a = m_b = m$ . Dès lors la masse totale du système  $M = m_a + m_b = 2m$  et la masse réduite  $\mu \equiv m_a m_b / (m_a + m_b) = m/2$ . Dans le système du centre de masse, l'hamiltonien décrivant le mouvement global des atomes et leur dynamique interne est

$$\hat{H} = \left( \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \hat{V} \right) \otimes \hat{\mathbb{1}}^{\text{int}} + \hat{\mathbb{1}}^{\text{ext}} \otimes \hat{H}_{\text{bd-eff}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad (7.11)$$

où  $\hat{\mathbf{P}} = \hbar \nabla_{\mathbf{R}} / i$ ,  $\hat{\mathbf{p}} = \hbar \nabla_{\mathbf{r}} / i$  en représentation des coordonnées,  $\hat{\mathbb{1}}^{\text{int}}$  ( $\hat{\mathbb{1}}^{\text{ext}}$ ) est l'opérateur identité sur l'espace des états internes (externes) des atomes et où  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$  est donné par l'expression (6.7) dans laquelle nous avons effectué le changement de variable  $(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) \rightarrow (\mathbf{R}, \mathbf{r})$  [16]. Les états propres de l'hamiltonien interne sont toujours donnés par (6.11) exprimé en fonction des coordonnées du centre de masse. Lorsque le système suit adiabatiquement l'état propre interne  $|\chi_i\rangle$ , nous obtenons l'équation de Schrödinger effective décrivant le mouvement total de l'atome

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_i(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = \left( \frac{(\hat{\mathbf{P}} - \mathbf{A}_{\mathbf{R}}^{(i)})^2}{2M} + \frac{(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{A}_{\mathbf{r}}^{(i)})^2}{2\mu} + \phi_{\mathbf{R}}^{(i)} + \phi_{\mathbf{r}}^{(i)} + \hat{V} + E_i \right) \psi_i(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) \quad (7.12)$$

où  $i = 0, \pm$  et les potentiels de jauge artificiels sont donnés par

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{\mathbf{R}}^{(\pm)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \frac{\hbar \mathbf{k}_L}{2} \left( -1 \pm \frac{|\Omega|}{\sqrt{|\Omega|^2 + 8V^2(\mathbf{r})}} \right) \\ \mathbf{A}_{\mathbf{r}}^{(\pm)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \mathbf{0} \\ \phi_{\mathbf{R}}^{(\pm)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \frac{\hbar^2}{M} \left( \frac{|\mathbf{k}_L|^2 V^2(\mathbf{r})}{|\Omega|^2 + 8V^2(\mathbf{r})} \right) \\ \phi_{\mathbf{r}}^{(\pm)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \frac{\hbar^2}{16\mu} \left[ |\mathbf{k}_L|^2 \left( 1 \mp \frac{|\Omega|}{\sqrt{|\Omega|^2 + 8V^2(\mathbf{r})}} \right) + \frac{16|\Omega|^2 |\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r})|^2}{(|\Omega|^2 + 8V^2(\mathbf{r}))^2} \right]. \end{aligned} \quad (7.13)$$

De même, si le système est initialement dans l'état  $|\chi_0\rangle$ , nous obtenons

$$\begin{aligned}\mathbf{A}_{\mathbf{R}}^{(0)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= -\hbar\mathbf{k}_L, \quad \phi_{\mathbf{R}}^{(0)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = 0 \\ \mathbf{A}_{\mathbf{r}}^{(0)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \mathbf{0}, \quad \phi_{\mathbf{r}}^{(0)}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \frac{\hbar^2|\mathbf{k}_L|^2}{8\mu}.\end{aligned}\quad (7.14)$$

Nous remarquons que les potentiels vecteurs associés à la position du centre de masse  $\mathbf{R}$  sont égaux à la somme des potentiels vecteurs agissant sur les atomes  $a$  et  $b$  tels que donnés par les équations (7.2) et (7.3). De même, les potentiels vecteurs associés aux coordonnées relatives  $\mathbf{r}$  sont nulles. Cette constatation s'explique aisément au regard de l'interprétation que nous avons donnée du potentiel vecteur artificiel en terme de la valeur moyenne de l'impulsion dans l'état interne suivi adiabatiquement. D'une part le potentiel vecteur artificiel est identique pour les deux atomes. D'autre part, l'impulsion du centre de masse  $\mathbf{P}$  est définie comme la somme des impulsions des atomes individuels et l'impulsion relative  $\mathbf{p}$  comme la moitié de leur différence. Il apparaît donc naturel que  $\mathbf{A}_{\mathbf{R}} = \mathbf{A}_a + \mathbf{A}_b = 2\mathbf{A}_a$  et  $\mathbf{A}_{\mathbf{r}} = (\mathbf{A}_a - \mathbf{A}_b)/2 = \mathbf{0}$ .

### 7.1.2 Désaccord en fréquence non nul

Intéressons-nous à présent à l'influence d'un désaccord en fréquence non nul mais homogène et constant au cours du temps sur l'équation d'évolution de deux atomes en régime de blocage dipolaire étudiée précédemment. Dans ce cas, les états propres  $|\chi_{\pm}\rangle$  sont donnés par l'équation (6.9). En appliquant le raisonnement de la section 4.2, nous obtenons les potentiels de jauge artificiels

$$\begin{aligned}\mathbf{A}_{\alpha}^{(\pm)}(\mathbf{r}_{\alpha}) &= \frac{\hbar\mathbf{k}_L}{4} \left( -1 \pm \frac{-8\delta^2 + 6\delta V + 3|\Omega|^2}{\sqrt{\eta}} \right) \\ \phi_{\alpha}^{(\pm)}(\mathbf{r}_{\alpha}) &= \frac{\hbar^2}{4m_{\alpha}} \left[ \frac{|\mathbf{k}_L|^2}{4} \left( 1 \pm \frac{8\delta^2 - 6\delta V - 3|\Omega|^2}{\sqrt{\eta}} \right) + \frac{|\mathbf{k}_L|^2|\Omega|^2(4\delta - 3V)^2\eta + 324|\Omega|^6|\nabla_{\mathbf{r}_{\alpha}}V|^2}{\eta^2} \right]\end{aligned}\quad (7.15)$$

où  $\eta = (8\delta^2 + |\Omega|^2)(8\delta^2 + 9|\Omega|^2) + 12V(-8\delta^3 - 13\delta|\Omega|^2 + 3V(\delta^2 + 2|\Omega|^2))$  est réel et positif. Nous ne rappelons pas les expressions des potentiels de jauge provenant du vecteur propre  $|\chi_0\rangle$  car celles-ci sont identiques au cas  $\delta = 0$ . La figure 7.4 représente le potentiel vecteur artificiel  $\mathbf{A}_a^{(+)}$  pour

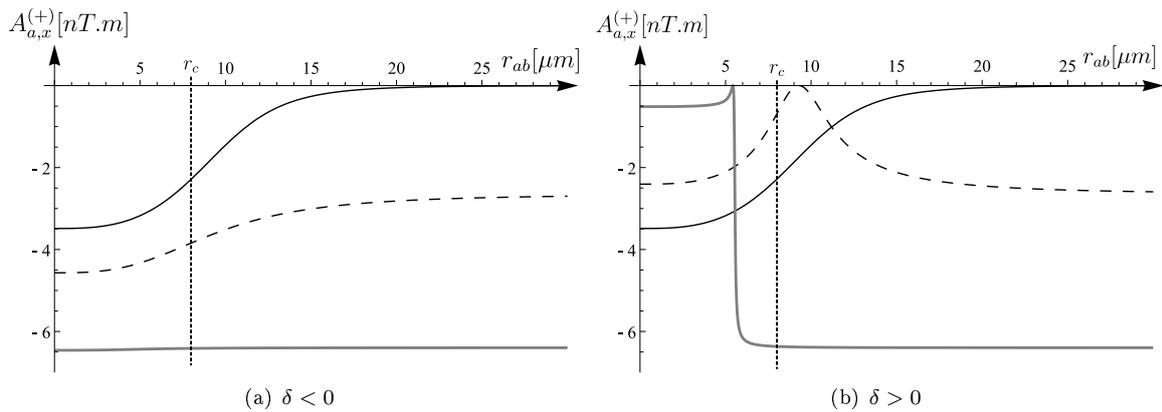


FIGURE 7.4 – Potentiel vecteur artificiel pour  $\mathbf{k}_L = (k_L, 0, 0)$  et différentes valeurs du désaccord en fréquence. Les graphiques représentent la composante selon  $\mathbf{e}_x$  de  $\mathbf{A}_a^{(+)}$  (unique composante non-nulle) en fonction de la distance entre atomes. (a)  $\mathbf{A}_a^{(+)}$  pour différentes valeurs de  $\delta < 0$  (de haut en bas,  $\delta/2\pi = 0, -3, -15$  Mhz). (b)  $\mathbf{A}_a^{(+)}$  pour différentes valeurs de  $\delta > 0$  (de haut en bas en  $r_{ab} = 0$ ,  $\delta/2\pi = 15, 3, 0$  Mhz). La distance critique  $r_c$  (eq. (6.8)) pour  $\delta = 0$  est représentée sur les graphiques.

différentes valeurs de  $\delta$ . Nous constatons que la valeur du désaccord en fréquence modifie sensiblement l'allure des potentiels vecteurs. Plus  $\delta$  est grand, plus la zone dans laquelle le potentiel vecteur varie appréciablement est étroite. Lorsque le désaccord en fréquence prend des valeurs négatives ( $\omega > \omega_L$ ), l'intensité du potentiel vecteur artificiel  $\mathbf{A}_a^{(+)}$  augmente. Cependant, plus  $|\delta|$  augmente ( $\delta < 0$ ), moins le potentiel vecteur artificiel varie en fonction de la distance entre atomes. Pour des valeurs positives du désaccord en fréquence ( $\omega < \omega_L$ ), la norme de  $\mathbf{A}_a^{(+)}$  en  $r_{ab} = 0$  diminue. Le taux de variation du potentiel vecteur augmente et un extremum apparaît. Cet extremum se déplace vers des distances interatomiques plus petites et est plus marqué lorsque le désaccord en fréquence augmente. Néanmoins, ce comportement apparaît dans une zone où le système n'est plus en régime de blocage dipolaire. En effet,  $\delta/2\pi = 15$  MHz,  $|\Omega|/2\pi = 6.5$  MHz et  $C_3/2\pi = 3200$  MHz. $\mu\text{m}^3$ , nous obtenons une distance critique  $r_c \approx 5.98$   $\mu\text{m}$  du même ordre de grandeur que la distance à laquelle l'extremum apparaît. Ce comportement pourrait être un artefact dû à l'utilisation d'un hamiltonien inapproprié. Afin de confirmer ou d'infirmer la présence d'un extremum dans les potentiels vecteurs artificiels, nous considérerons, dans la section suivante, la dépendance par rapport au désaccord en fréquence des potentiels de jauge artificiels calculés à partir des états propres de l'hamiltonien général (6.4). Les autres potentiels vecteurs,  $\mathbf{A}_a^{(-)}$  et  $\mathbf{A}_b^{(\pm)}$ , présentent un comportement similaire vis-à-vis du désaccord en fréquence. Le comportement des potentiels vecteurs dans la limite  $r_{ab} \rightarrow 0$  peut se comprendre en prenant  $V \gg \delta, |\Omega|$ . Dans ce cas, les potentiels vecteurs sont donnés par les expressions approchées (pour  $V > 0$ )

$$\mathbf{A}_\alpha^{(\pm)}(\mathbf{r}_\alpha) \approx \frac{\hbar \mathbf{k}_L}{4} \left( -1 \pm \frac{\delta}{\sqrt{\delta^2 + 2|\Omega|^2}} \right) \quad (7.16)$$

ce qui montre bien que  $|\mathbf{A}_a^{(+)}(0)|$  augmente lorsque  $\delta < 0$  et diminue si  $\delta > 0$ .

Les champs magnétiques artificiels associés à ces potentiels vecteurs s'obtiennent au moyen de l'équation (5.9) et valent

$$\mathbf{B}_\alpha^{(\pm)}(\mathbf{r}_\alpha) = \pm \frac{18\hbar|\Omega|^4(4\delta - 3V)}{\eta^{3/2}} \nabla_{\mathbf{r}_\alpha} V \times \mathbf{k}_L. \quad (7.17)$$

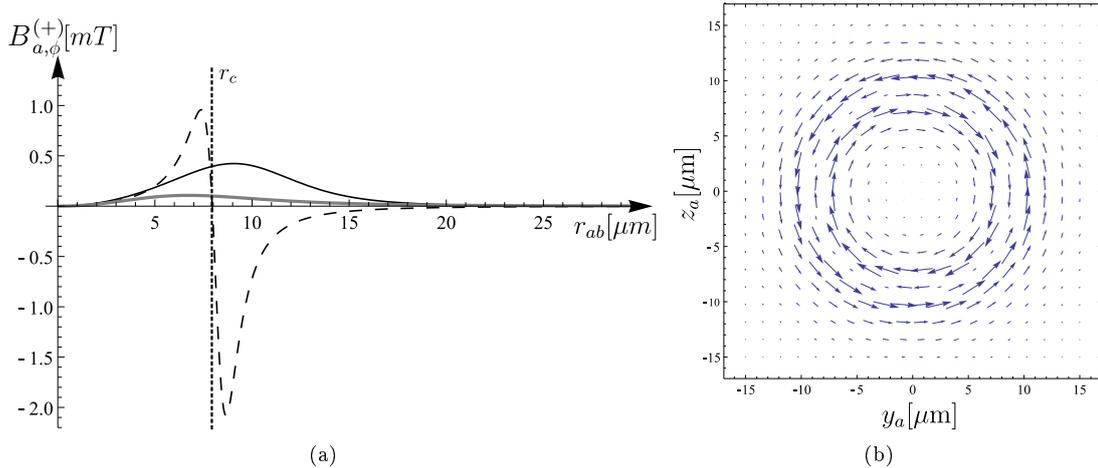


FIGURE 7.5 – Champ magnétique artificiel pour  $\mathbf{k}_L = k_L \mathbf{e}_x$  et pour différentes valeurs du désaccord en fréquence. (a) Intensité du champ magnétique  $\mathbf{B}_a^{(+)}$  en fonction de la distance entre atomes pour  $\delta/2\pi = 0$  (trait noir),  $\delta/2\pi = +3$  MHz (trait discontinu) et  $\delta/2\pi = -3$  MHz (trait épais et gris). La distance critique  $r_c$  (éq. (6.8) pour  $\delta = 0$ ) est représentée sur le graphique. (b) Champ magnétique artificiel  $\mathbf{B}_a^{(+)}$  dans le plan  $y_a - z_a$  ( $x_a = 0$ ) pour  $\delta > 0$ . L'atome  $b$  se trouve à l'origine du système de référence.

La figure 7.5(a) représente l'intensité du champ magnétique  $\mathbf{B}_a^{(+)}$  dans le cas où le vecteur d'onde est dirigé selon  $\mathbf{e}_x$  pour différentes valeurs du désaccord en fréquence. Elle diminue au fur et à mesure que  $\delta$  devient de plus en plus négatif et augmente lorsque le désaccord en fréquence prend des valeurs positives de plus en plus grandes. De plus, pour  $\delta > 0$ , le champ magnétique artificiel change de sens de rotation à une distance entre atomes telle que  $V = 4\delta/3$ . Ce changement du signe de  $\mathbf{B}_a^{(\pm)}$  correspond à l'extremum du potentiel vecteur que nous avons mentionné précédemment. Il apparaît ici évident que ce changement de signe s'opère à une distance entre atomes où l'hamiltonien effectif (6.7) ne décrit plus correctement le système et met une fois de plus l'accent sur la nécessité de déterminer les potentiels de jauge artificiels au moyen de l'hamiltonien (6.4). Comme en l'absence de désaccord en fréquence, le champ magnétique artificiel est un champ tournant dans le plan perpendiculaire au vecteur d'onde du laser (c.f. figure 7.5(b)).

Les potentiels scalaires artificiels donnés par l'expression (7.15) sont également modifiés par le désaccord en fréquence. Le potentiel  $\phi_a^{(\pm)}$  est illustré sur la figure 7.6 pour différentes valeurs de  $\delta$ . Le désaccord en fréquence produit des effets similaires sur les potentiels scalaires et vecteurs. La

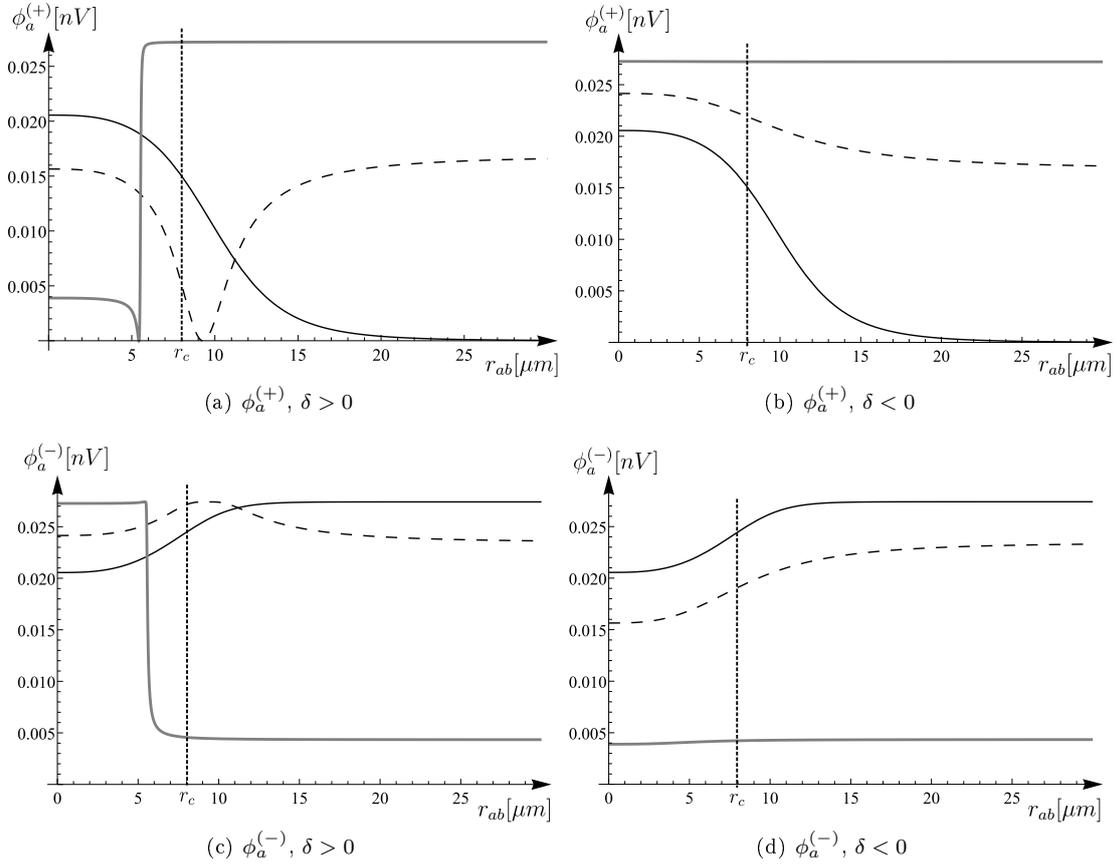


FIGURE 7.6 – Potentiels scalaires artificiels  $\phi_a^{(\pm)}$  pour différentes valeurs du désaccord en fréquence. La courbe noire correspond au cas  $\delta = 0$ . La courbe en trait discontinu correspond à  $|\delta|/2\pi = 3$  MHz et celle en trait épais et gris à  $|\delta|/2\pi = 15$  MHz. La distance critique  $r_c$  (éq. (6.8) pour  $\delta = 0$ ) est représentée sur les graphiques.

valeur du potentiel scalaire pour  $r_{ab} \rightarrow 0$  est modifiée par le désaccord en fréquence et l'intervalle de distance entre atomes sur lequel le potentiel scalaire varie se réduit lorsque  $\delta$  augmente. La manière dont  $\phi_a^{(\pm)}$  varie sur cet intervalle est également profondément modifiée par le désaccord en fréquence. Pour  $\delta < 0$ , le potentiel scalaire varie moins avec la distance entre atomes que dans le cas  $\delta = 0$ . Au

contraire, lorsque  $\delta > 0$ , le taux de variation du potentiel scalaire en fonction de la distance augmente et un extremum apparaît. Cet extremum est plus marqué dans le cas de  $\phi_\alpha^{(+)}$  et correspond à un minimum pour  $\phi_\alpha^{(+)}$  mais à un maximum pour  $\phi_\alpha^{(-)}$ . Comme précédemment, cet extremum apparaît à une distance où  $V \approx \delta$ , ce qui signifie que l'hamiltonien effectif (6.7) n'est plus applicable. Néanmoins, cette approche fondée sur un hamiltonien effectif en régime de blocage dipolaire permet de mettre en évidence que le champ magnétique est maximum pour des distances interatomiques telles que  $V \approx \delta$ .

Contrairement au cas  $\delta = 0$ , en présence d'un désaccord en fréquence, le choix du signe du décalage en énergie du niveau doublement excité influence les potentiels et champs de jauge artificiels. Lorsque  $\hbar V(r_{ab}) < 0$ , l'effet du signe du désaccord en fréquence est inversé. Un désaccord en fréquence positif tend à diminuer les variations des potentiels de jauge artificiels et conduit à des champs magnétiques artificiels moins intenses qu'en l'absence de désaccord en fréquence. Au contraire, lorsque  $\delta < 0$ , les variations des potentiels de jauge artificiels sont renforcées, ce qui conduit à une augmentation de l'intensité des champs magnétiques artificiels qui en découlent. Ce phénomène s'explique par la présence dans (7.15) de termes en  $\delta V$  invariants sous un changement de signe simultané de  $V$  et  $\delta$ .

## 7.2 Cas général

Comme nous venons de le voir, l'interaction dipolaire électrique entre atomes plongés dans des champs lasers génère des potentiels de jauge artificiels qualitativement différents de ceux obtenus en considérant des atomes indépendants. Jusqu'à présent, nous nous sommes intéressé au régime de blocage dipolaire décrit par l'hamiltonien effectif (6.7). Cet hamiltonien a l'avantage de présenter des énergies et vecteurs propres dont l'expression analytique est relativement simple, ce qui permet de comprendre plus facilement l'émergence et les caractéristiques des potentiels de jauge artificiels associés. Néanmoins, l'évaluation des champs de jauge artificiels pour différentes valeurs des paramètres nous montre que le champ magnétique artificiel prend des valeurs importantes essentiellement dans l'intervalle de distances entre atomes où le système passe du régime de blocage dipolaire à courte distance au régime d'atomes indépendants lorsqu'ils sont éloignés. Dans cette région, l'hamiltonien (6.7) ne décrit plus correctement le système car le décalage en énergie du niveau doublement excité  $V$  est du même ordre de grandeur que la fréquence de Rabi ou le désaccord en fréquence. Il est donc nécessaire de calculer les potentiels de jauge artificiels au moyen de l'hamiltonien général (6.4). Afin de pouvoir comparer les résultats prédits sur base des hamiltoniens  $\hat{H}_{\text{bd}}$  et  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$ , il est nécessaire de rajouter à  $\hat{H}_{\text{bd}}$  le terme  $(-\hbar\delta/3)\hat{\mathbb{1}}^{\text{int}}$  que nous avons rajouté lors de la construction de l'hamiltonien effectif.

Dans la base  $\{|\psi_-\rangle, |ee\rangle, |\psi_+\rangle, |gg\rangle\}$ , l'hamiltonien prend la forme

$$\hat{H}_{\text{bd}} = \hbar \begin{pmatrix} -\frac{\delta}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V - \frac{4\delta}{3} & \frac{\Omega}{\sqrt{2}} e^{i\mathbf{k}_L \cdot (\mathbf{r}_a + \mathbf{r}_b)} & 0 \\ 0 & \frac{\Omega^*}{\sqrt{2}} e^{-i\mathbf{k}_L \cdot (\mathbf{r}_a + \mathbf{r}_b)} & -\frac{\delta}{3} & \frac{\Omega}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & \frac{\Omega^*}{\sqrt{2}} & \frac{2\delta}{3} \end{pmatrix} \quad (7.18)$$

L'état  $|\psi_-\rangle \equiv |\chi_0\rangle$  est état propre de  $\hat{H}_{\text{bd}}$  d'énergie propre  $E_0 = -\hbar\delta/3$ . Les trois autres énergies propres de  $\hat{H}_{\text{bd}}$  présentent des formes analytiques plus compliquées,

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\hbar}{3} \left[ -\delta + V + 2\sqrt{3\delta^2 - 3\delta V + V^2 + 3|\Omega|^2} \cos\left(\frac{\arg(z)}{3}\right) \right] \\ E_2 &= \frac{\hbar}{3} \left[ -\delta + V - \sqrt{3\delta^2 - 3\delta V + V^2 + 3|\Omega|^2} \left( \cos\left(\frac{\arg(z)}{3}\right) + \sqrt{3} \sin\left(\frac{\arg(z)}{3}\right) \right) \right] \\ E_3 &= \frac{\hbar}{3} \left[ -\delta + V - \sqrt{3\delta^2 - 3\delta V + V^2 + 3|\Omega|^2} \left( \cos\left(\frac{\arg(z)}{3}\right) - \sqrt{3} \sin\left(\frac{\arg(z)}{3}\right) \right) \right] \end{aligned} \quad (7.19)$$

où  $z = x + iy \in \mathbb{C}$  avec

$$\begin{aligned} x &= 18\delta^2 V - 18\delta V^2 + 4V^3 - 9V|\Omega|^2 \\ y &= \sqrt{16(3\delta^2 - 3\delta V + V^2 + 3|\Omega|^2)^3 - V^2(18\delta^2 - 18\delta V + 4V^2 - 9|\Omega|^2)^2} \end{aligned} \quad (7.20)$$

où  $x$  et  $y$  sont réels et non nuls,  $|\Omega|$  est la fréquence de Rabi,  $\delta$  est le désaccord en fréquence,  $\hbar V$  est le décalage en énergie du niveau doublement excité donné par l'équation (6.3) et où la fonction  $\arg(z)$  est définie par

$$\arg(z) = \begin{cases} 2 \arctan\left(\frac{y}{x + \sqrt{x^2 + y^2}}\right) & \text{si } x > 0 \text{ ou } y \neq 0 \\ \pi & \text{si } x < 0 \text{ et } y = 0 \\ \text{indéfini} & \text{si } x = 0 \text{ et } y = 0 \end{cases} \quad (7.21)$$

Les énergies propres (7.19) sont représentées sur la figure 7.7 en fonction de la distance entre atomes. L'énergie propre  $E_1$  correspond, pour des distances interatomiques faibles, au décalage en énergie du niveau doublement excité  $\hbar V$ . L'état propre correspondant tend donc vers l'état  $|ee\rangle$  pour des faibles valeurs de  $r_{ab}$ . De même,  $E_2$  ( $E_3$ ) tend vers l'énergie propre  $E_-$  ( $E_+$ ) de l'hamiltonien effectif dans la limite  $V \gg \delta, |\Omega|$  et il en va de même pour les vecteurs propres. Pour rappel, les états et les énergies propres de  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$  sont donnés par les expressions (6.9) et (6.10). Dans la base  $\{|\psi_-\rangle, |ee\rangle, |\psi_+\rangle, |gg\rangle\}$ ,

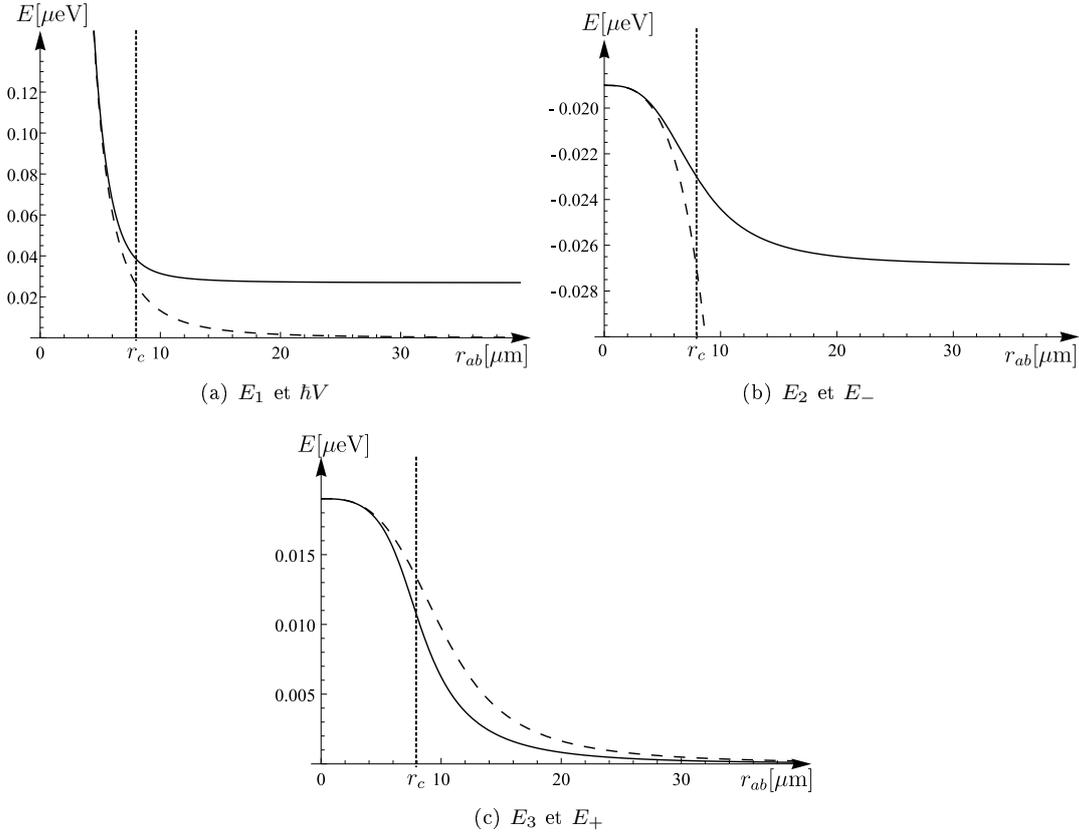


FIGURE 7.7 – Comparaison entre les énergies propres de l'hamiltonien  $\hat{H}_{\text{bd}}$  et de l'hamiltonien effectif  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$  pour  $\delta = 0$  en fonction de  $r_{ab}$ . Les énergies propres de  $\hat{H}_{\text{bd}}$  sont représentées en trait plein, celles de l'hamiltonien effectif en trait discontinu. La distance critique  $r_c$ , donnée par l'équation (6.8), est représentée sur le graphique.

les vecteurs propres associés aux énergies propres (7.19) de  $\hat{H}_{\text{bd}}$  sont donnés par

$$|\chi_i\rangle = \mathcal{N}_i \left[ \hbar\Omega e^{i\mathbf{k}_L \cdot (\mathbf{r}_a + \mathbf{r}_b)} \mathcal{E}_i |ee\rangle + \sqrt{2} \mathcal{E}_i \mathcal{F}_i |\psi_+\rangle + \hbar\Omega^* \mathcal{F}_i |gg\rangle \right] \quad (7.22)$$

avec

$$\mathcal{E}_i = E_i - \frac{2\hbar\delta}{3} \quad \text{et} \quad \mathcal{F}_i = \frac{4\hbar\delta}{3} - \hbar V + E_i \quad (7.23)$$

où  $i = 1, 2, 3$  et  $\mathcal{N}_i$  une constante de normalisation qui vaut

$$\mathcal{N}_i = \frac{1}{\sqrt{\hbar^2 |\Omega|^2 \mathcal{E}_i^2 + 2\mathcal{E}_i^2 \mathcal{F}_i^2 + \hbar^2 |\Omega|^2 \mathcal{F}_i^2}}. \quad (7.24)$$

Pour des distances interatomiques élevées,  $r_{ab} \gg r_c$ , le phénomène de blocage dipolaire disparaît car le décalage en énergie du niveau doublement excité tend vers une valeur nulle. Dans ce cas, la dynamique du système se réduit à celle de deux atomes indépendants telle que décrite par l'hamiltonien (5.2) où la fréquence de Rabi est constante et  $\delta = 0$ . Les potentiels de jauge artificiels ressentis par les atomes sont donnés par l'expression (4.14) et sont, dans cette limite, indépendants de la position des atomes. La force de Lorentz classiquement ressentie par une particule plongée dans de tels potentiels de jauge artificiels est strictement nulle.

### 7.2.1 Désaccord en fréquence nul

En suivant le raisonnement de la section 4.2, nous sommes en mesure de calculer les potentiels de jauge artificiels qui émergent de l'hamiltonien (7.18). Dans un premier temps, nous allons nous intéresser à la situation où le désaccord en fréquence est nul. Dans ce cas, lorsque le système se trouve initialement dans l'état interne  $|\chi_i\rangle$  ( $i = 1, 2, 3$ ), les potentiels vecteurs artificiels ont pour expression

$$\mathbf{A}_\alpha^{(i)} = -\frac{E_i^2 [\hbar^2 |\Omega|^2 + (E_i - \hbar V)^2]}{2E_i^4 - 2\hbar^3 |\Omega|^2 V E_i - 4\hbar V E_i^3 + \hbar^4 |\Omega|^2 V^2 + 2\hbar^2 (|\Omega|^2 + V^2) E_i^2} \hbar \mathbf{k}_L \quad (7.25)$$

avec  $\alpha = a, b$  et  $E_i$  l'énergie propre de l'état interne  $|\chi_i\rangle$  donnée par (7.19). Les potentiels vecteurs artificiels sont représentés sur les figures 7.8(a), 7.8(c) et 7.8(e). De manière similaire à ce que nous observons en régime de blocage dipolaire, les potentiels vecteurs artificiels prennent la forme du produit du vecteur d'onde du laser  $\mathbf{k}_L$  par un champ scalaire qui dépend de la position des atomes exclusivement au travers du décalage en énergie du niveau doublement excité  $\hbar V(r_{ab})$ . Remarquons que les potentiels vecteurs artificiels sont identiques pour les deux atomes. Bien que nous ayons calculé les expressions analytiques exactes des potentiels de jauge artificiels, celles-ci sont trop compliquées pour permettre d'en déduire qualitativement le comportement des différents potentiels. Pour de faibles distances entre atomes, le potentiel  $\mathbf{A}_\alpha^{(2)}$  ( $\mathbf{A}_\alpha^{(3)}$ ) correspond au potentiel  $\mathbf{A}_\alpha^{(-)}$  ( $\mathbf{A}_\alpha^{(+)}$ ) en régime de blocage dipolaire, ce qui confirme la correspondance entre les états propres de  $\hat{H}_{\text{bd}}$  et  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$  que nous avons établie en comparant les énergies propres de ces deux hamiltoniens. Le potentiel  $\mathbf{A}_\alpha^{(-)}$  présente qualitativement la même forme que  $\mathbf{A}_\alpha^{(2)}$  pour toutes distances interatomiques, alors que celle de  $\mathbf{A}_\alpha^{(+)}$  est totalement différente de celle de  $\mathbf{A}_\alpha^{(3)}$  pour des valeurs de  $r_{ab} \gtrsim r_c$ . Remarquons également que les potentiels vecteurs varient essentiellement dans la région où le système passe du régime de blocage dipolaire au régime d'atomes indépendants pour  $r_{ab} \gg r_c$ .

Les champs magnétiques artificiels associés à ces potentiels vecteurs s'obtiennent au moyen de l'équation (5.9) et nous avons

$$\mathbf{B}_\alpha^{(i)} = \nabla_{\mathbf{r}_\alpha} \left( -\frac{\hbar E_i^2 [\hbar^2 |\Omega|^2 + (E_i - \hbar V)^2]}{2E_i^4 - 2\hbar^3 |\Omega|^2 V E_i - 4\hbar V E_i^3 + \hbar^4 |\Omega|^2 V^2 + 2\hbar^2 (|\Omega|^2 + V^2) E_i^2} \right) \times \mathbf{k}_L. \quad (7.26)$$

Comme la position des atomes apparaît uniquement dans le décalage en énergie du niveau doublement excité  $\hbar V$  au travers de  $r_{ab}$ , nous avons  $\mathbf{B}_b^{(i)} = -\mathbf{B}_a^{(i)}$ . Les figures 7.8(b), 7.8(d) et 7.8(f) représentent

les amplitudes de ces champs magnétiques artificiels. Comme le laissaient présager les variations de l'amplitude des potentiels vecteurs en fonction de la distance interatomique, les champs magnétiques

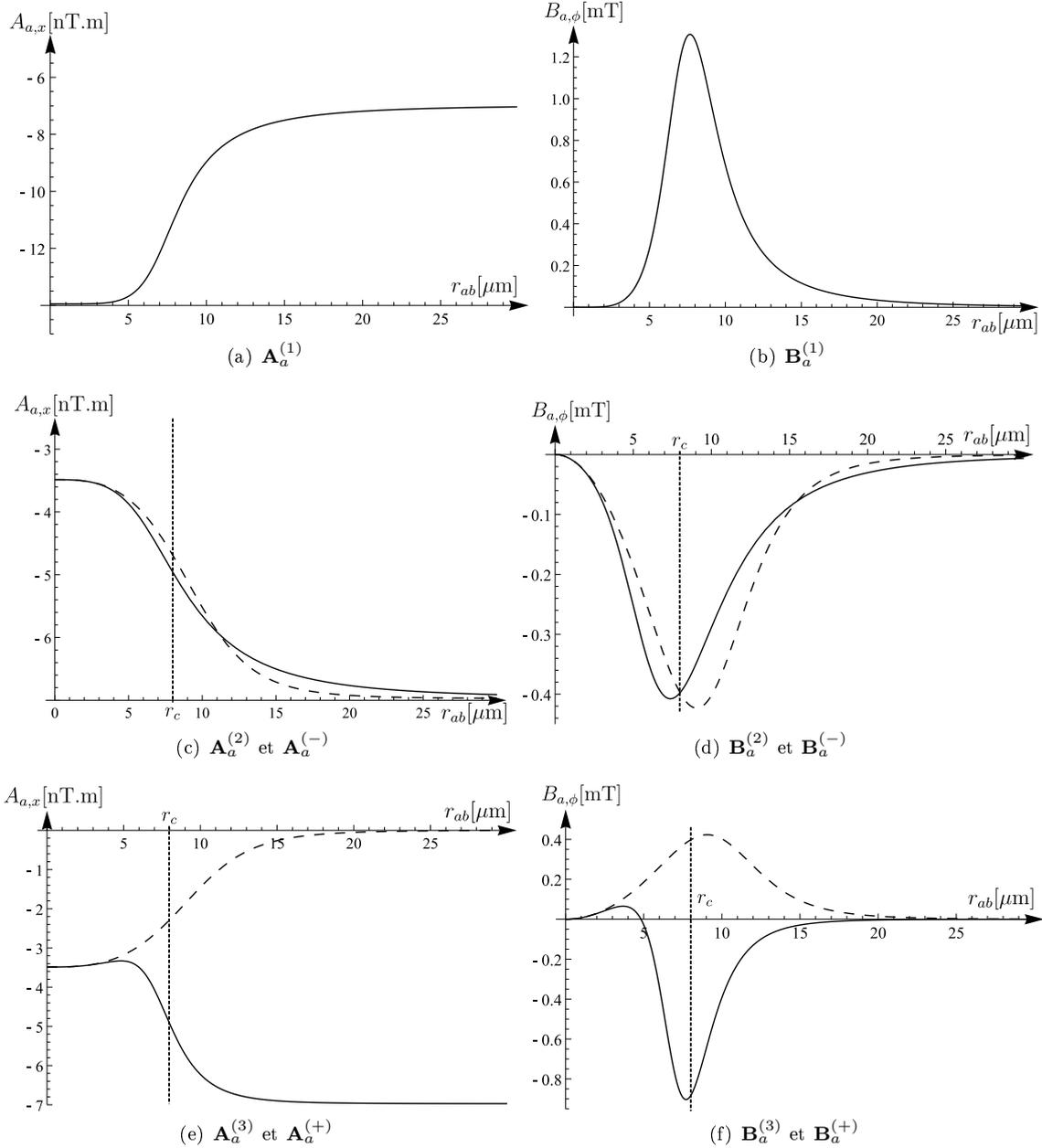


FIGURE 7.8 – (a), (c) et (e) Potentiels vecteurs artificiels  $\mathbf{A}_a^{(i)}$  ( $i = 1, 2, 3$ ) pour un vecteur d'onde dirigé selon  $\mathbf{e}_x$ . Les graphiques représentent la composante selon  $\mathbf{e}_x$  (unique composante non nulle) des potentiels vecteurs en fonction de  $r_{ab}$  (trait continu). (b), (d) et (f) Amplitudes des champs magnétiques artificiels  $\mathbf{B}_a^{(i)}$  ( $i = 1, 2, 3$ ) en fonction de  $r_{ab}$  (trait plein). À titre de comparaison, les potentiels vecteurs (éq. (7.2)) et les amplitudes des champs magnétiques (éq. (7.4)) découlant de l'hamiltonien effectif sont également représentés (trait discontinu). La distance critique  $r_c$ , donnée par l'équation (6.8), est représentée sur les graphiques.

artificiels prennent une valeur importante à la transition entre le régime de blocage dipolaire et le régime d'atomes indépendants. La similarité des potentiels vecteurs  $\mathbf{A}_a^{(2)}$  et  $\mathbf{A}_a^{(-)}$  se répercute au niveau des champs magnétiques associés  $\mathbf{B}_a^{(2)}$  et  $\mathbf{B}_a^{(-)}$ . Au contraire, l'amplitude du champ  $\mathbf{B}_a^{(3)}$  change de signe pour  $r_{ab} \approx 5 \mu\text{m}$ , ce qui correspond à un changement du sens du champ magnétique artificiel, tandis que le champ  $\mathbf{B}_a^{(+)}$  tourne toujours dans la même sens. De manière générale, le champ magnétique artificiel est en tout point perpendiculaire au vecteur d'onde. Plus précisément, il s'agit d'un champ vectoriel tournant dans le plan orthogonal au vecteur d'onde du laser. En effet, considérons un vecteur d'onde de la forme  $\mathbf{k}_L = (k_L, 0, 0)$  et supposons que l'atome  $b$  soit maintenu à l'origine du système de référence. Le champ magnétique artificiel (éq. (7.26)) s'écrit sous la forme du produit vectoriel de  $\mathbf{k}_L$  et du gradient d'une fonction scalaire ne dépendant que de  $r_{ab} = r_a$ , qui est dirigé selon  $\mathbf{e}_{r_a}$  en coordonnées sphériques  $(r_a, \theta, \phi)$  (éq. (7.5)). Il en découle que  $\mathbf{B}_a^{(i)}$  est dirigé selon  $\mathbf{e}_\phi$ , ce qui correspond à un champ magnétique tournant dans le plan  $y_a - z_a$ . Ce comportement est illustré sur la figure 7.9(a) pour le champ magnétique artificiel  $\mathbf{B}_a^{(1)}$ .

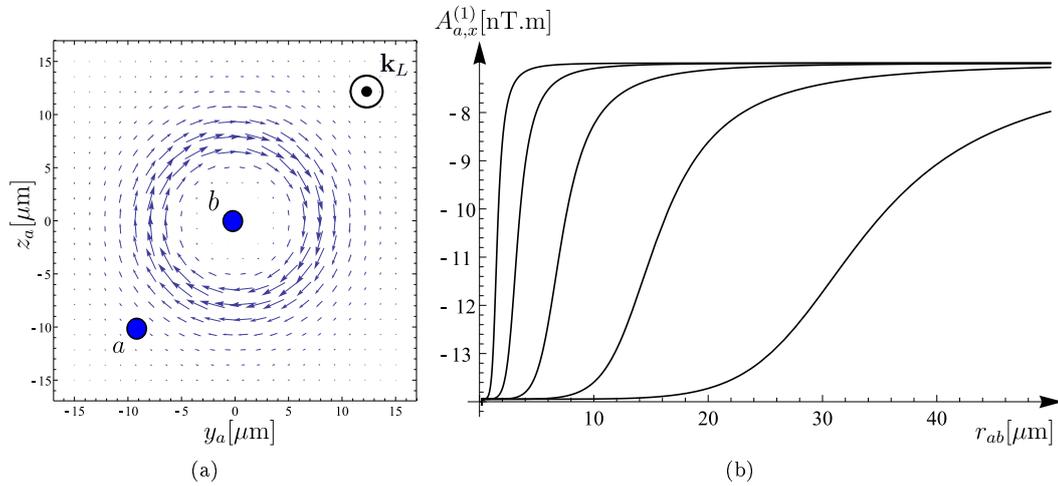


FIGURE 7.9 – (a) Champ magnétique artificiel  $\mathbf{B}_a^{(1)}$ , dans le plan  $y_a - z_a$  ( $x_a = 0$ ) pour  $\mathbf{k}_L = k_L \mathbf{e}_x$ , ressenti par l'atome  $a$  lorsque l'atome  $b$  est situé à l'origine du système de coordonnées. (b) Unique composante non nulle du potentiel vecteur artificiel  $\mathbf{A}_a^{(1)}$  en fonction  $r_{ab}$  pour différentes valeurs de la fréquence de Rabi (de gauche à droite  $|\Omega|/2\pi = 1000, 100, 10, 1, 0.1$  MHz).

Comme en régime de blocage dipolaire, la fréquence de Rabi ne modifie pas qualitativement la forme des potentiels de jauge artificiels. La figure 7.9(b) représente la composante selon  $\mathbf{e}_x$  du potentiel scalaire  $\mathbf{A}_a^{(1)}$  en fonction de la distance entre atomes pour différentes valeurs de la fréquence de Rabi ( $|\Omega|/2\pi = 1000, 100, 10, 1, 0.1$  MHz). Nous constatons que plus la fréquence de Rabi est grande, plus l'intervalle de distance sur lequel les potentiels varient appréciablement est court. De plus, cet intervalle de variation est déplacé vers les faibles valeurs de  $r_{ab}$ . En conséquence, l'intervalle sur lequel le champ magnétique artificiel est non négligeable présente le même comportement. De plus, la valeur maximale du champ magnétique artificiel augmente avec la fréquence de Rabi. Les potentiels vecteurs artificiels  $\mathbf{A}_a^{(2)}$  et  $\mathbf{A}_a^{(3)}$  et les champs magnétiques associés  $\mathbf{B}_a^{(2)}$  et  $\mathbf{B}_a^{(3)}$  sont influencés d'une manière similaire par la fréquence de Rabi.

Afin d'estimer l'ordre de grandeur de l'intensité des champs magnétiques artificiels, rappelons les valeurs de la fréquence de Rabi,  $|\Omega|/2\pi = 6.5$  Mhz, de la longueur d'onde du laser,  $\lambda_L = 296$  nm et du décalage en énergie,  $\hbar V(r_{ab}) = h 3200 [\text{Mhz} \cdot \mu\text{m}^3]/r_{ab}^3 [\mu\text{m}^3]$ . Dans ce cas, nous obtenons des champs magnétiques artificiels dont l'intensité maximale correspond à un champ magnétique réel de l'ordre du mT agissant sur un électron et qui varient sur un intervalle de distance entre atomes de quelques  $\mu\text{m}$ .

Remarquons que  $\mathbf{B}_a^{(1)}$  prend une valeur maximale sensiblement plus importante que les deux autres champs magnétiques artificiels.

L'évolution adiabatique de l'état interne de l'atome conduit également à l'apparition de potentiels scalaires artificiels. L'expression analytique de ceux-ci étant très longue et peu explicite, nous ne la reproduisons pas ici. Les potentiels scalaires sont identiques pour les deux atomes car leur position n'intervient dans  $\hbar V$  qu'au travers de  $r_{ab} = |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|$  et l'expression des potentiels scalaires artificiels est donnée par la somme des modules au carré des projections du gradient de l'état interne commun aux deux atomes sur le sous-espace orthogonal. La figure 7.10 représente  $\phi_a^{(i)}$  ( $i = 1, 2, 3$ ) en fonction de la distance entre atomes. Comme précédemment, les potentiels scalaires artificiels varient essentiellement

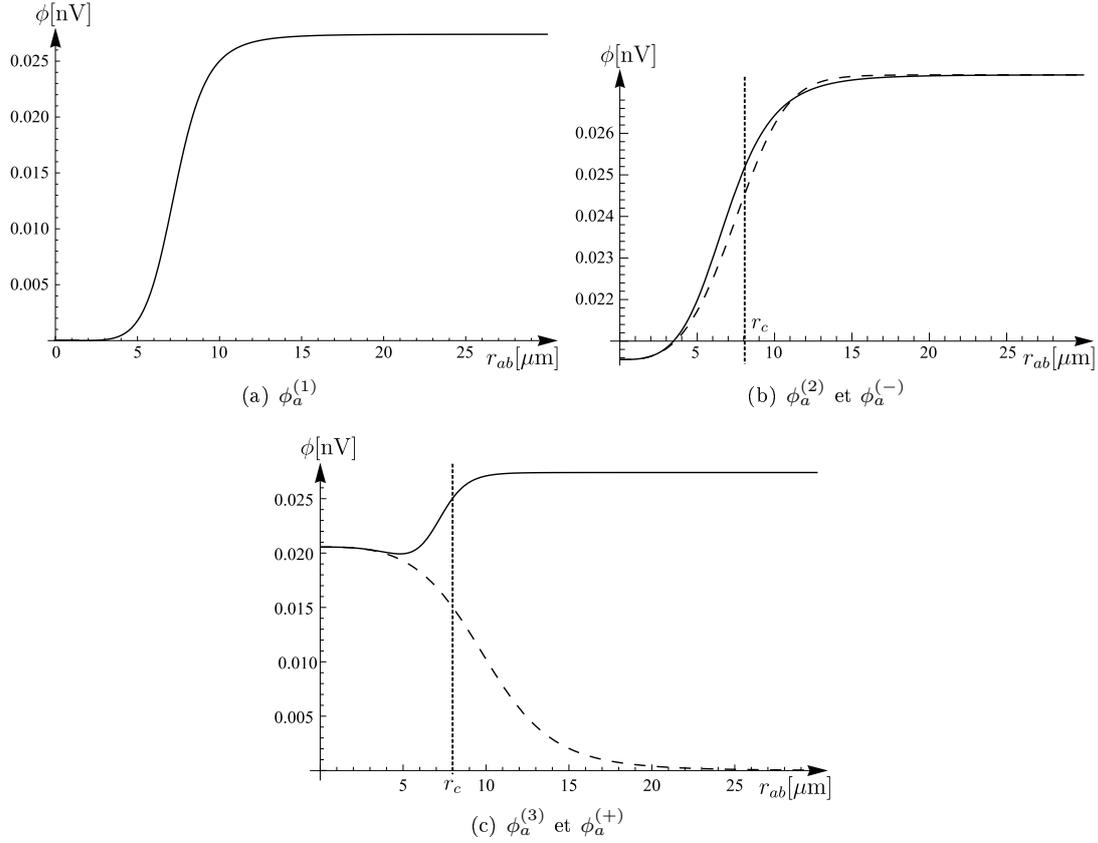


FIGURE 7.10 – Potentiels scalaires artificiels  $\phi_a^{(i)}$  ( $i = 1, 2, 3$ ) en fonction de  $r_{ab}$  (trait plein). À titre de comparaison, les potentiels scalaires artificiels découlant de l'hamiltonien effectif  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$  (éq. (7.2)) sont également représentés (trait discontinu). La distance critique  $r_c$ , donnée par l'équation (6.8), est indiquée sur les graphiques.

dans l'intervalle de distance où le système passe du régime de blocage dipolaire au régime d'atomes indépendants. De même, le potentiel scalaire  $\phi_a^{(2)}$  ( $\alpha = a, b$ ) et son équivalent calculé en régime de blocage dipolaire  $\phi_a^{(-)}$  présentent qualitativement la même dépendance spatiale alors que  $\phi_a^{(3)}$  et  $\phi_a^{(+)}$  ont une dépendance spatiale complètement différente.

### 7.2.2 Désaccord en fréquence non nul

Intéressons-nous à présent à l'influence du désaccord en fréquence sur les potentiels de jauge artificiels. Pour un désaccord en fréquence arbitraire, les potentiels vecteurs artificiels sont donnés par

$$\mathbf{A}_\alpha^{(i)} = \frac{\mathcal{A}_i}{\mathcal{B}_i} \hbar \mathbf{k}_L \quad (7.27)$$

avec

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_i &= (2\hbar\delta - 3E_i)^2 [\hbar^2(16\delta^2 + 9|\Omega|^2) + 3(8\hbar\delta + 3E_i - 3\hbar V)(E_i - \hbar V)] \\ \mathcal{B}_i &= 162E_i^4 + 108\hbar(2\delta - 3V)E_i^3 - 6\hbar^3(2\delta - 3V)(16\delta^2 - 9|\Omega|^2 - 12\delta V)E_i \\ &\quad - 54\hbar^2(4\delta^2 - 3|\Omega|^2 - 3V^2)E_i^2 + \hbar^4[4\delta^2(32\delta^2 + 45|\Omega|^2) + 3V(8\delta^2 + 9|\Omega|^2)(3V - 8\delta)]. \end{aligned} \quad (7.28)$$

où  $E_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) est l'énergie propre de l'état  $|\chi_i\rangle$  donnée par (7.19). Ceux-ci sont représentés sur la figure 7.11 pour différentes valeurs de  $\delta$ . Remarquons que les potentiels vecteurs sont tous propor-

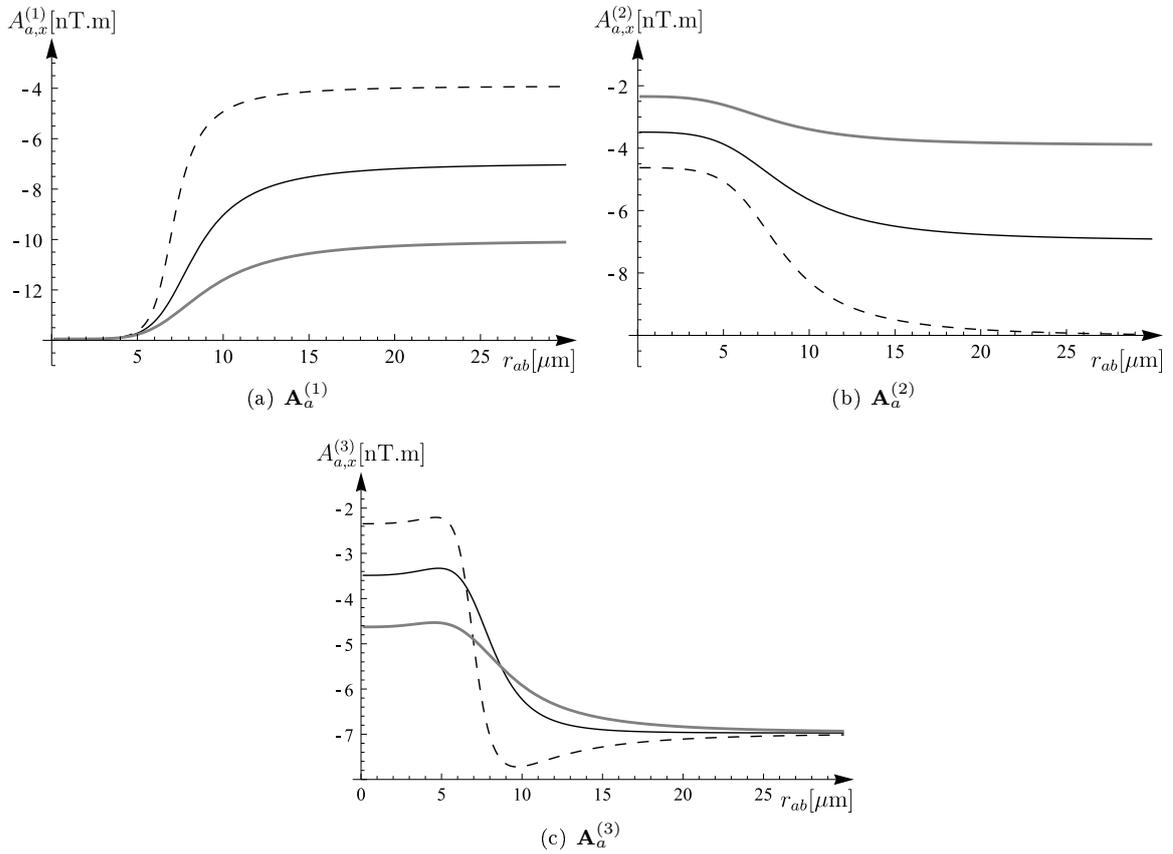


FIGURE 7.11 – Potentiels vecteurs artificiels  $\mathbf{A}_a^{(i)}$  ( $i = 1, 2, 3$ ) pour  $\mathbf{k}_L = (k_L, 0, 0)$ . L'unique composante non nulle  $A_{a,x}^{(i)}$  est représentée en fonction de la distance interatomique  $r_{ab}$  pour différentes valeurs du désaccord en fréquence. Les courbes en trait continu noir correspondent à un désaccord en fréquence nul. Les courbes en trait discontinu correspondent à  $\delta/2\pi = +3$  MHz ( $\omega < \omega_L$ ) et celles en trait épais et gris à  $\delta/2\pi = -3$  MHz ( $\omega > \omega_L$ ).

tionnels au vecteur d'onde  $\mathbf{k}_L$ . Le champ magnétique artificiel s'obtient au moyen de l'équation (5.9). Comme pour un désaccord en fréquence nul, nous obtenons des champs magnétiques artificiels tournant dans le plan perpendiculaire au vecteur d'onde du laser. Les amplitudes de ces champs sont

représentées sur la figure 7.12 en fonction de la distance entre atomes pour différentes valeurs du désaccord en fréquence positives et négatives ( $\delta/2\pi = 0, \pm 3$  MHz). Tout comme dans le régime de

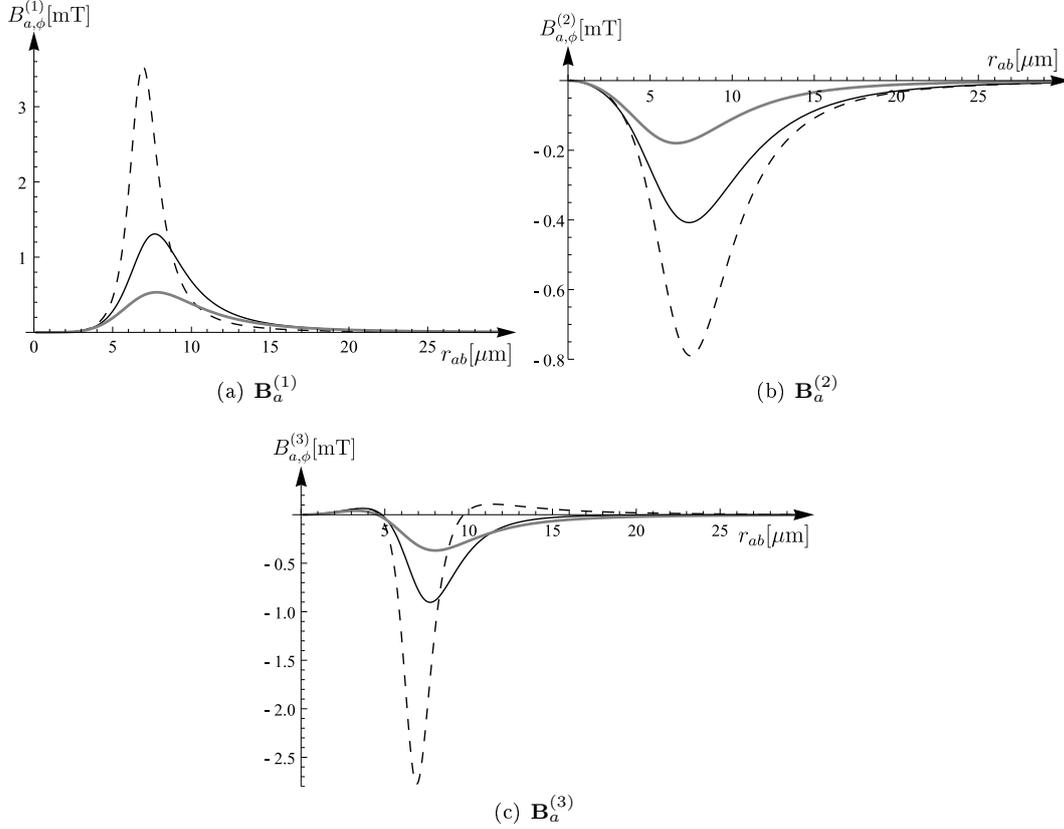


FIGURE 7.12 – Amplitudes des champs magnétiques artificiels  $\mathbf{B}_a^{(i)}$  en fonction de la distance interatomique pour différentes valeurs du désaccord en fréquence. Les courbes en trait continu correspondent à un désaccord en fréquence nul. Les courbes en trait discontinu correspondent à  $\delta/2\pi = +3$  MHz et celles en trait épais et gris à  $\delta/2\pi = -3$  MHz.

blocage dipolaire, les potentiels vecteurs artificiels et les champs magnétiques associés sont fortement influencés par le désaccord en fréquence. Une valeur négative du désaccord en fréquence ( $\omega > \omega_L$ ) a pour effet de diminuer les variations spatiales des potentiels vecteurs, ce qui se traduit par une diminution de l'intensité des champs magnétiques artificiels associés. À l'inverse, lorsque  $\delta > 0$  ( $\omega < \omega_L$ ) les potentiels vecteurs varient de manière plus marquée en fonction de  $r_{ab}$  et sur un intervalle de distance entre atomes légèrement plus court, ce qui entraîne une augmentation notable de l'intensité maximale des champs magnétiques artificiels au détriment de l'intervalle de distance interatomique sur lequel ils prennent des valeurs non-négligeables. Remarquons que le potentiel vecteur  $\mathbf{A}_a^{(3)}$  voit l'apparition d'un second point d'inflexion lorsque le désaccord en fréquence est positif ce qui se traduit par un second changement de signe de  $\mathbf{B}_a^{(3)}$ .

Nous avons mis en évidence lors de l'étude des potentiels de jauge artificiels issus de l'évolution adiabatique des états propres de l'hamiltonien effectif  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$ , dans la sous-section 7.1.2, un brusque changement de signe des champs magnétiques artificiels à une distance entre atomes telle que  $V = 4\delta/3$ . La figure 7.13 compare les champs magnétiques artificiels obtenus à partir des états propres des hamiltoniens  $\hat{H}_{\text{bd}}$  et  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$  pour un désaccord en fréquence positif ( $\delta/2\pi = 3$  MHz). Bien que les champs magnétiques artificiels  $\mathbf{B}_a^{(-)}$  ( $\mathbf{B}_a^{(+)}$ ) et  $\mathbf{B}_a^{(2)}$  ( $\mathbf{B}_a^{(3)}$ ) coïncident à de faibles distances interatomiques,  $\mathbf{B}_a^{(2)}$  et  $\mathbf{B}_a^{(3)}$  ne présentent pas de brusques changements de signe pour  $V(r_{ab}) = 4\delta/3$ . Notons

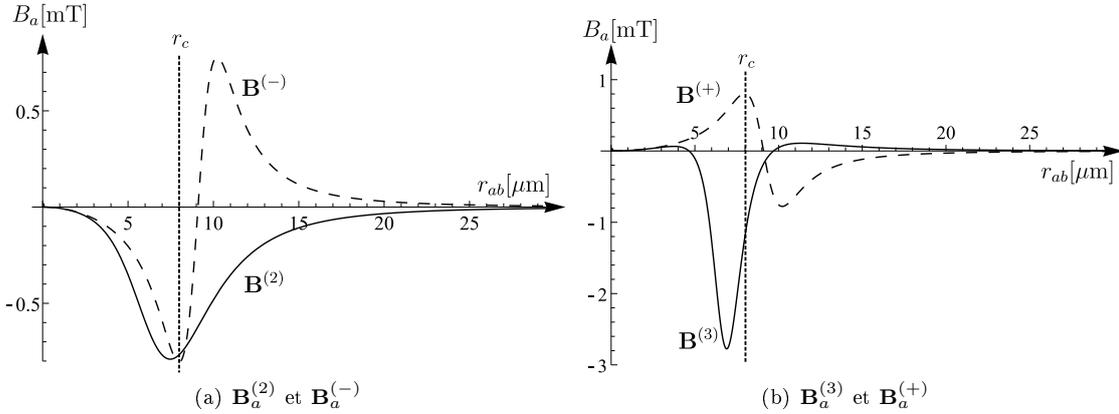


FIGURE 7.13 – Comparaison entre les amplitudes des champs magnétiques artificiels calculés à partir de l’hamiltonien  $\hat{H}_{\text{bd}}$  (trait plein) et de l’hamiltonien effectif  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$  (trait discontinu). Les amplitudes des champs magnétiques artificiels sont représentées en fonction de la distance entre atomes pour un désaccord en fréquence  $\delta/2\pi$  positif valant 3 Mhz. La distance critique  $r_c$ , donnée par l’équation (6.8), est représentée sur le graphique.

que  $\mathbf{B}_a^{(3)}$  présente un changement de signe à une distance similaire, mais qui ne correspond aucunement à celui se produisant pour  $\mathbf{B}_a^{(+)}$ . Nous en concluons que le changement de signe de  $\mathbf{B}_a^{(\pm)}$  lorsque  $V(r_{ab}) = 4\delta/3$  est un artefact provenant des approximations effectuées pour dériver l’hamiltonien effectif (6.7).

Le désaccord en fréquence influence également les potentiels scalaires artificiels. Ceux-ci sont représentés sur la figure 7.14 pour différentes valeurs du désaccord en fréquence ( $\delta = 0, \pm 3$  Mhz). Le désaccord en fréquence a un effet similaire sur les potentiels scalaires à celui observé sur les potentiels vecteurs. Plus précisément, lorsque  $\delta < 0$ , les potentiels scalaires subissent des variations moins importantes en fonction de la distance entre atomes. À l’inverse, lorsque  $\delta > 0$ , les variations de  $\phi_a^{(i)}$  sont plus marquées et pour  $\delta$  suffisamment grand, un maximum local apparaît. Nous avons également constaté l’apparition d’un extremum dans les potentiels scalaires  $\phi_\alpha^{(\pm)}$  calculés à partir des états propres de l’hamiltonien  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$  (c.f. figure 7.6). La figure 7.15 compare les potentiels scalaires obtenus à partir des états propres  $|\chi_i\rangle$  ( $i = 2, 3$ ) de  $\hat{H}_{\text{bd}}$  à ceux obtenus en considérant les états propres  $|\chi_\pm\rangle$  de l’hamiltonien effectif. Les potentiels scalaires artificiels  $\phi_\alpha^{(2)}$  et  $\phi_\alpha^{(-)}$  ont qualitativement la même forme. Au contraire,  $\phi_\alpha^{(3)}$  et  $\phi_\alpha^{(+)}$ , bien que coïncidants à de faibles distances interatomiques, ont un comportement totalement différent lorsque  $r_{ab}$  augmente. Le potentiel scalaire artificiel  $\phi_\alpha^{(+)}$  passe par un minimum de valeur nulle tandis qu’à une distance comparable,  $\phi_\alpha^{(3)}$  présente un maximum. La différence de comportement entre  $\phi_\alpha^{(3)}$  et  $\phi_\alpha^{(+)}$  pour  $r_{ab} \gtrsim r_c$  provient des approximations utilisées pour obtenir l’hamiltonien effectif  $\hat{H}_{\text{bd-eff}}$ .

De manière similaire à ce qui se passe en régime de blocage dipolaire, lorsque nous considérons un décalage en énergie  $\hbar V(r_{ab})$  négatif, l’effet du signe du désaccord en fréquence est inversé. Un désaccord en fréquence négatif tend à augmenter les variations des potentiels de jauge artificiels en fonction de la distance interatomique, ce qui conduit à des champs magnétiques plus intenses. Au contraire, lorsque  $\delta > 0$ , les variations spatiales des potentiels de jauge artificiels sont plus faibles et les champs magnétiques résultants ont une intensité moindre. Ce comportement provient certainement de la présence de termes du type  $\delta V$ , invariant sous l’effet d’un changement de signe simultané de  $\delta$  et  $V$ , mais la complexité des expressions analytiques des potentiels et champs de jauge artificiels rend difficile une interprétation précise de l’origine de ce comportement. De plus, les champs magnétiques artificiels  $\mathbf{B}_\alpha^{(1)}$  et  $\mathbf{B}_\alpha^{(2)}$  calculés avec  $\hbar V(r_{ab}) < 0$  sont de sens opposés par rapport au cas où ils sont calculés avec  $\hbar V(r_{ab}) > 0$ . Ce phénomène, absent en régime de blocage dipolaire, est également difficile à interpréter au moyen des expressions analytiques correspondantes.

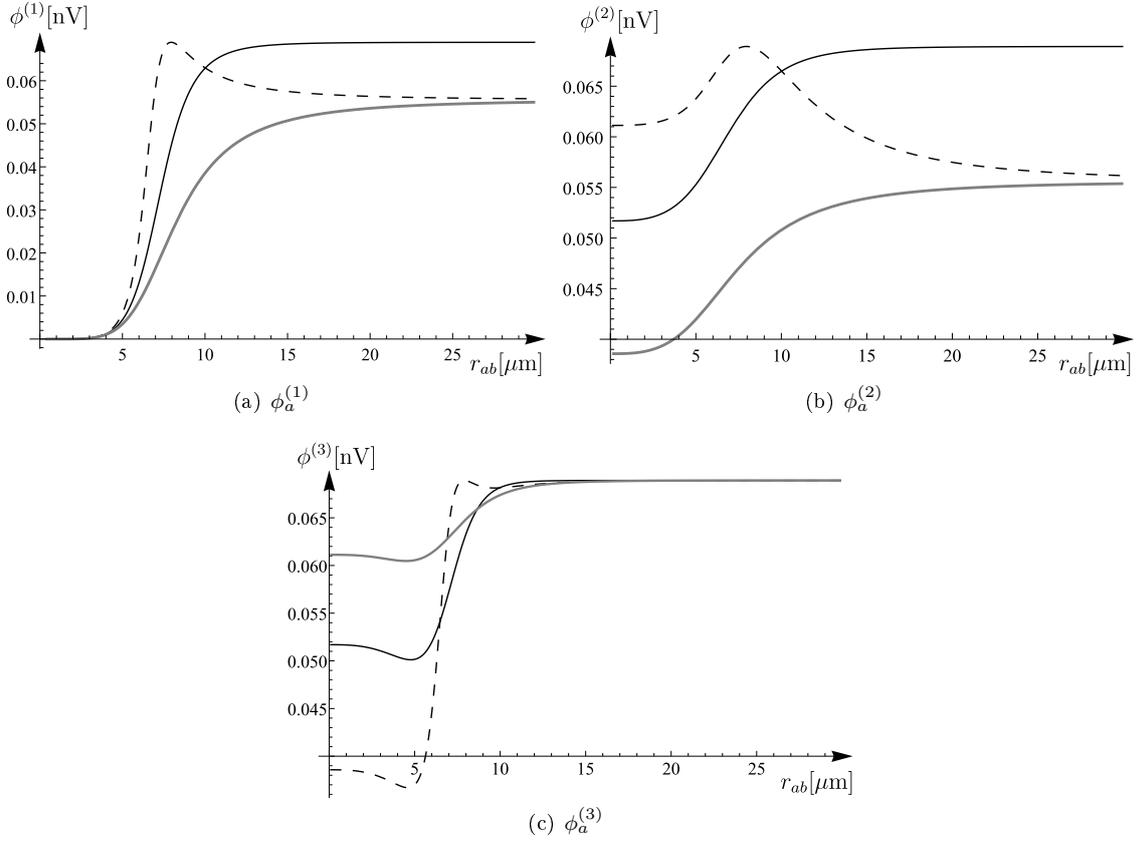


FIGURE 7.14 – Potentiels scalaires artificiels  $\phi_a^{(i)}$  ( $i = 1, 2, 3$ ) en fonction de  $r_{ab}$  pour différentes valeurs de  $\delta$ . Les courbes en trait continu noir correspondent à un désaccord en fréquence nul, celles en trait discontinu à  $\delta/2\pi = +3$  MHz et celles en trait épais et gris à  $\delta/2\pi = -3$  MHz.

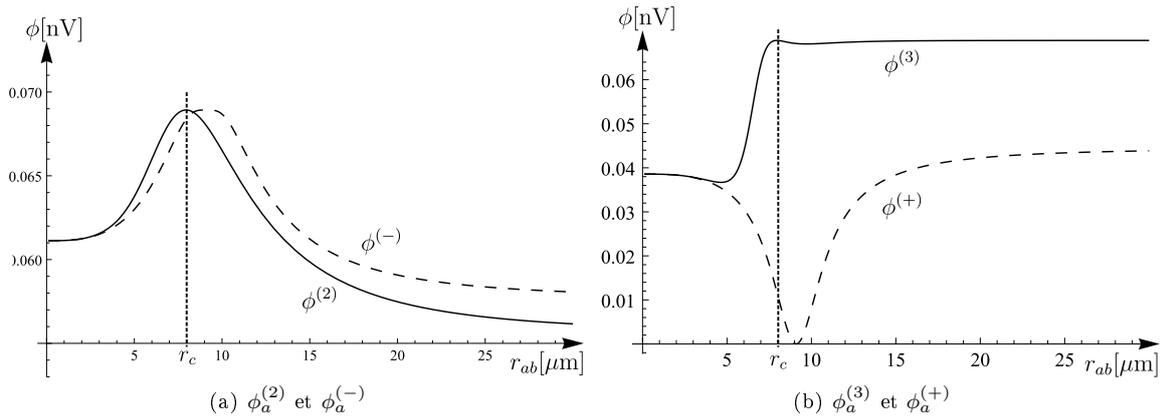


FIGURE 7.15 – Comparaison entre les potentiels scalaires artificiels  $\phi_a^{(2)}$  ( $\phi_a^{(3)}$ ) en trait plein et  $\phi_a^{(-)}$  ( $\phi_a^{(+)}$ ) en trait discontinu. Les potentiels scalaires sont représentés en fonction de  $r_{ab}$  pour  $\delta/2\pi = 3$  Mhz. La distance critique  $r_c$ , donnée par l'équation (6.8), est représentée sur le graphique.

# Conclusion

L'objet de ce mémoire est la simulation de champs de jauge par le biais de l'évolution adiabatique de l'état interne d'atomes neutres plongés dans des faisceaux lasers. Nous avons présenté de manière originale diverses méthodes d'obtention de tels champs artificiels proposées dans la littérature. Nous avons également examiné l'effet des interactions dipolaires électriques entre atomes neutres dans ce contexte.

Nous avons tout d'abord présenté les outils nécessaires à la compréhension de l'émergence de potentiels de jauge artificiels induits par l'interaction entre atomes neutres et lasers. Au chapitre 1, nous avons rappelé les concepts sous-jacents à la théorie électromagnétique et aux théories de jauge dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste. Dans le chapitre 2, nous avons introduit le théorème adiabatique ainsi que le concept de phase géométrique (ou de Berry) qui en découle. Le chapitre 3 a été consacré à l'approche semi-classique de l'interaction entre lumière et atomes, ces derniers étant modélisés par des systèmes à deux ou trois niveaux.

Au chapitre 4, nous avons exposé diverses méthodes d'obtention de potentiels de jauge artificiels. Nous nous sommes focalisé sur les potentiels et champs de jauge artificiels qui émergent de l'évolution adiabatique des états habillés d'atomes neutres à deux et trois niveaux en interaction avec des champs lasers. Dans le cas d'atomes à deux niveaux, nous avons étudié les potentiels et champs de jauge de manière extensive dans une nouvelle paramétrisation des états propres de l'hamiltonien interne. Par ailleurs, nous avons associés aux faisceaux lasers des densités de charge et de courant artificielles, sources des potentiels de jauge artificiels. Lors de la discussion de l'origine physique des potentiels de jauge artificiels, nous avons exposé le lien étroit entre le potentiel vecteur et la phase géométrique. De plus, nous avons donné une interprétation simple des potentiels vecteur et scalaire artificiels, respectivement, en terme de la valeur moyenne et de la variance de l'opérateur impulsion dans l'état interne de l'atome. Nous avons ensuite discuté de la généralisation de ce raisonnement à des cas plus complexes, notamment au cas d'états propres internes dégénérés qui conduit à l'apparition de potentiels de jauge artificiels non-abéliens. Nous nous sommes également intéressé aux réalisations expérimentales de l'équipe de Y. Lin [31–33] qui ont mis en évidence pour la première fois ces potentiels de jauge artificiels.

La seconde partie de ce mémoire a été consacrée à l'étude des potentiels de jauge artificiels provenant de l'évolution adiabatique de l'état interne d'un système à deux atomes dans différents régimes. Au chapitre 5, nous avons montré que les potentiels de jauge artificiels ressentis par des atomes indépendants sont strictement identiques à ceux obtenus en ne considérant qu'un seul atome. Nous nous sommes ensuite concentré sur un système composé de deux atomes à deux niveaux interagissant au travers de l'interaction dipolaire électrique. Dans le chapitre 6, nous avons exposé une manière simple de modéliser l'interaction dipolaire entre atomes par l'ajout d'un terme décrivant le décalage en énergie du niveau doublement excité à l'hamiltonien décrivant la dynamique interne des atomes. Nous avons expliqué comment ce décalage en énergie peut mener au phénomène de blocage dipolaire. Afin de simplifier l'analyse des potentiels de jauge artificiels, nous avons dérivé un hamiltonien effectif qui décrit la dynamique interne des atomes en régime de blocage dipolaire. Le chapitre 7 fait l'objet de l'étude extensive des potentiels de jauge artificiels qui émergent de l'évolution adiabatique de l'état interne de ce système de deux atomes en interaction dipolaire plongés dans un champ laser dont le désaccord en fréquence  $\delta$  et la fréquence de Rabi  $\Omega$  sont homogènes et constants. Nous avons montré

que chaque atome est soumis à un champ magnétique artificiel tournant dans le plan orthogonal au vecteur d'onde du laser, centré sur la position de l'autre atome et d'une intensité de l'ordre du millitesla. Les champs magnétiques artificiels prennent des valeurs non négligeables lorsque le système passe du régime de blocage dipolaire à courtes distances interatomiques au régime d'atomes indépendants à grandes distances. Ce comportement se démarque de celui du cas d'atomes indépendants, où les champs magnétiques artificiels sont non nuls uniquement si le désaccord en fréquence ou la fréquence de Rabi est non homogène. De plus, dans le cas d'atomes indépendants, nous avons montré que la direction du champ magnétique artificiel est fixée et ne correspond aucunement à un champ tournant. Ces différences proviennent du fait que le décalage en énergie du niveau doublement excité dépend de la distance entre atomes. Dans le cas d'atomes en interaction dipolaire électrique, le désaccord en fréquence  $\delta$  modifie sensiblement les champs de jauge artificiels. Lorsque  $\delta < 0$ , le champ magnétique artificiel est moins intense qu'à la résonance ( $\delta = 0$ ). Inversement, un désaccord en fréquence positif a pour effet d'augmenter l'intensité du champ magnétique artificiel.

En perspective de ce travail, il serait intéressant de généraliser les résultats obtenus dans ce mémoire à la situation où le désaccord en fréquence ou la fréquence de Rabi dépendent de la position des atomes. De même, l'étude d'un système de deux atomes à trois niveaux en interaction dipolaire électrique constitue une extension naturelle de l'analyse proposée dans ce mémoire. Cette situation est particulièrement pertinente car il s'agit de la configuration utilisée dans la plupart des expériences traitant du blocage dipolaire. Enfin, il serait intéressant d'étudier la dynamique du mouvement global des atomes en interaction dipolaire électrique, afin de déterminer si les potentiels de jauge artificiels établis au chapitre 7 peuvent notamment conduire à l'apparition d'états liés.

# Annexes



## Annexe A

# Mouvement quantique d'une particule chargée dans des champs électromagnétiques

### A.1 Généralités

Dans cette annexe, nous nous intéressons au mouvement d'une particule chargée plongée dans des champs électrique et magnétique. D'un point de vue classique, le mouvement de la particule est décrit par la seconde loi de Newton (1.1) où la force agissant sur la particule est la force de Lorentz (1.2). De manière équivalente, le mouvement de la particule en utilisant les formalismes lagrangien ou hamiltonien.

Lors du passage de la description classique à la description quantique, les différentes grandeurs physiques introduites précédemment deviennent des opérateurs agissant sur des fonctions d'ondes appartenant à un espace d'Hilbert. À la position  $\mathbf{r}$  est associée l'opérateur position  $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ . De même, à l'impulsion canonique  $\mathbf{p}$  est associée l'opérateur impulsion  $\hat{\mathbf{p}}$ <sup>1</sup>. Ces opérateurs sont liés par les relations de commutation [48]

$$[\hat{r}_\alpha, \hat{r}_\beta] = 0, \quad [\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta] = 0, \quad [\hat{r}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta} \quad (\text{A.1})$$

où les indices  $\alpha$  et  $\beta$  courent sur  $x$ ,  $y$  ou  $z$  et où  $\delta_{\alpha\beta}$  vaut 1 si  $\alpha = \beta$  et 0 sinon. À partir de ces opérateurs, l'opérateur hamiltonien du système  $\hat{H}$  est obtenu en remplaçant dans l'expression (1.10) les différentes variables canoniques par les opérateurs correspondants, ce qui donne [48]

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t))^2}{2m} + q\phi(\hat{\mathbf{r}}, t). \quad (\text{A.2})$$

L'évolution quantique d'une particule chargée plongée dans des champs électrique et magnétique est donc décrite par l'équation de Schrödinger (1.19). En utilisant l'équation (1.9) faisant le lien entre l'impulsion canonique  $\mathbf{p}$  et la vitesse  $\mathbf{v}$ , il est possible de définir l'opérateur vitesse

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{1}{m}(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)). \quad (\text{A.3})$$

Remarquons que l'opérateur vitesse peut aussi être déduit du commutateur entre l'hamiltonien et l'opérateur position [8]

$$\hat{v}_\alpha = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{r}_\alpha]. \quad (\text{A.4})$$

---

1. En mécanique quantique, l'opérateur impulsion est le générateur des translations spatiales [8]

Au moyen de l'opérateur vitesse, il est possible de réécrire l'hamiltonien sous la forme

$$\hat{H} = \frac{1}{2}m\hat{\mathbf{v}}^2 + q\phi(\hat{\mathbf{r}}, t). \quad (\text{A.5})$$

Il est utile de calculer les relations de commutation des opérateurs vitesses et positions et celles des composantes de l'opérateur vitesse entre elles. Nous avons [8, 48]

$$\begin{aligned} [\hat{r}_\alpha, \hat{v}_\beta] &= \frac{i\hbar}{m}\delta_{\alpha\beta} \\ [\hat{v}_\alpha, \hat{v}_\beta] &= \frac{iq\hbar}{m^2} \sum_{\gamma=x,y,z} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} B_\gamma(\hat{\mathbf{r}}, t) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

avec  $B_\gamma$  la composante du champ magnétique dans la direction  $\mathbf{e}_\gamma$  et  $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$  le symbole de Levi-Civita donné par l'équation (1.23). Ces relations de commutation ont pour conséquence qu'il existe une relation d'incertitude entre les mêmes composantes de la position et de la vitesse de la particule [48],

$$\Delta r_\alpha \Delta v_\alpha \geq \frac{\hbar}{2m} \quad (\text{A.7})$$

avec  $\Delta r_\alpha$  et  $\Delta v_\alpha$  les écarts quadratiques moyens des opérateurs correspondants. Cette relation est la même que pour une particule libre (car dans ce cas, on a simplement  $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{p}}/m$ ) et donc, la présence d'un champ électromagnétique ne modifie pas cette relation d'incertitude.

Il est intéressant d'étudier l'évolution temporelle de la valeur moyenne des opérateurs  $\hat{\mathbf{r}}$  et  $\hat{\mathbf{v}}$ . Pour rappel, l'évolution temporelle de la valeur moyenne d'un opérateur  $\hat{O}$  est donnée, en vertu du théorème d'Ehrenfest [48], par

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{O}\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{O}, \hat{H}]\rangle + \frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{O}\rangle. \quad (\text{A.8})$$

En appliquant ce résultat à l'opérateur position, nous obtenons [8, 48]

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle = \langle\hat{\mathbf{v}}\rangle \quad (\text{A.9})$$

ce qui correspond au résultat classique. De même, nous avons pour l'évolution de la valeur moyenne de la vitesse [8, 48]

$$m\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{v}}\rangle = \langle\mathbf{F}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{v}}, t)\rangle \quad (\text{A.10})$$

avec

$$\mathbf{F}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{v}}, t) = \frac{q}{2}(\hat{\mathbf{v}} \times \mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}}, t) - \mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}}, t) \times \hat{\mathbf{v}}) + q\mathbf{E}(\hat{\mathbf{r}}, t). \quad (\text{A.11})$$

Ce résultat rend bien l'équation de Newton (1.1) avec la force de Lorentz (1.2) symétrisée sur  $\hat{\mathbf{r}}$  et  $\hat{\mathbf{v}}$  car ces deux opérateurs ne commutent pas.

## A.2 Champ magnétique homogène

### A.2.1 Traitement classique

#### Équations de Newton pour un champ $\mathbf{B}$ homogène

Considérons le cas particulier d'un champ magnétique homogène,  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ , et d'un champ électrique nul [48]. Dans ce cas, les équations du mouvement (1.1) fournissent le système d'équations

$$\begin{cases} m\ddot{x} = q\dot{y}B \\ m\ddot{y} = -q\dot{x}B \\ m\ddot{z} = 0. \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

Ce système admet pour solution

$$\begin{cases} x(t) = x_0 + r \cos(\omega_c t + \phi_0) \\ y(t) = y_0 + r \sin(\omega_c t + \phi_0) \\ z(t) = z_0 + v_{0,z} t \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

où  $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ ,  $\mathbf{v}_0 = (v_{0,x}, v_{0,y}, v_{0,z})$ ,  $r$  et  $\phi_0$  sont déterminés par les conditions initiales. Dans la direction  $\mathbf{e}_z$  du champ magnétique, la particule se déplace en ligne droite à vitesse constante. Dans le plan  $x - y$  perpendiculaire au champ magnétique  $\mathbf{B}$ , la particule effectue un mouvement circulaire uniforme à vitesse angulaire

$$\omega_c = |q| \frac{B}{m} \quad (\text{A.14})$$

de rayon  $r$  et centré en  $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0)$ . La fréquence correspondante,  $f_c = \omega_c/2\pi$ , est appelée fréquence cyclotron. Le mouvement global de la particule est une hélice d'axe parallèle à  $\mathbf{e}_z$ . Le mouvement dans le plan  $x - y$  est décrit par le vecteur  $\mathbf{r}(t) = (x(t), y(t))$  et la vitesse dans ce plan est  $\mathbf{v}_\perp = d\mathbf{r}/dt$ . Dans un système de coordonnées dont l'origine est située en  $\mathbf{r}_0$ , la position de la particule est donnée par  $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0$  avec

$$\begin{cases} x'(t) = \frac{v_y(t)}{\omega_c} \\ y'(t) = -\frac{v_x(t)}{\omega_c} \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

En repassant aux coordonnées  $\mathbf{r}$ , nous obtenons

$$\begin{cases} x(t) = x_0 + \frac{v_y(t)}{\omega_c} \\ y(t) = y_0 - \frac{v_x(t)}{\omega_c} \end{cases} \quad (\text{A.16})$$

### Hamiltonien du système

Le cas du champ magnétique uniforme considéré précédemment est décrit par l'hamiltonien

$$H = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2}{2m}. \quad (\text{A.17})$$

Il est commode de décomposer cet hamiltonien en un terme  $H_\parallel$  dépendant des coordonnées dans la direction parallèle au champ magnétique constant et en un terme  $H_\perp$  décrivant le mouvement de la particule dans le plan perpendiculaire à  $\mathbf{B}$ . L'hamiltonien du système s'écrit dès lors

$$H = H_\perp + H_\parallel \quad (\text{A.18})$$

avec

$$H_\perp = \frac{(p_x - qA_x)^2 + (p_y - qA_y)^2}{2m} = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2) \quad (\text{A.19})$$

et

$$H_\parallel = \frac{(p_z - qA_z)^2}{2m} = \frac{1}{2}mv_z^2. \quad (\text{A.20})$$

Afin de résoudre de déterminer le mouvement de la particule à partir de l'hamiltonien (A.17), il est nécessaire de fixer la jauge. Dans le cas qui nous intéresse ici, deux choix de jauge particulièrement simples sont

- la jauge de Landau dans laquelle  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  [12]. Cette jauge a la propriété d'être invariante par translation selon  $\mathbf{e}_x$  et  $\mathbf{e}_z$ .
- La jauge axiale dans laquelle  $\mathbf{A} = (\mathbf{B} \times \mathbf{r})/2 = (-By/2, Bx/2, 0)$  [48]. Cette jauge est invariante par rotation autour de l'axe  $Oz$  parallèle au champ magnétique.

### Constantes du mouvement

Le système formé d'une particule plongée dans un champ magnétique uniforme présente plusieurs constantes du mouvement. Intéressons-nous à ces quantités conservées car elles joueront un rôle important dans la compréhension du mouvement quantique.

Tout d'abord, les hamiltoniens  $H_{\perp}$  et  $H_{\parallel}$  sont indépendants du temps car il s'agit des énergies cinétiques associées respectivement aux mouvements perpendiculaire et parallèle au champ magnétique [48]. Le carré du rayon  $r$  de la trajectoire circulaire dans le plan  $x - y$  est aussi une constante du mouvement [48]. En effet, les équations (A.16) et (1.9) impliquent la relation

$$r^2 = \frac{2}{m\omega_c^2} H_{\perp} \quad (\text{A.21})$$

qui montre que  $r^2$  est une quantité conservée.

Notons  $\theta$  le moment de quantité de mouvement  $m\mathbf{v}$  calculé par rapport au centre de la trajectoire circulaire dans le plan  $x - y$ ,

$$\theta = (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \times m\mathbf{v}. \quad (\text{A.22})$$

À partir des équations (A.16) et (1.9), la composante selon l'axe  $\mathbf{e}_z$  de  $\theta$  vaut

$$\begin{aligned} \theta_z &= m[(x - x_0)v_y - (y - y_0)v_x] \\ &= \frac{2}{\omega_c} H_{\perp} \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

qui montre que  $\theta_z$  est également une quantité conservée.

Remarquons que la composante  $L_z$  du moment cinétique  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$  dépend du choix de jauge effectué et n'est en général pas une constante du mouvement [48].

## A.2.2 Traitement quantique

### Généralités

Afin de déterminer la dynamique d'une particule chargée plongée dans un champ magnétique uniforme, il faut trouver les valeurs propres et les états propres de l'hamiltonien  $\hat{H}$  obtenu en substituant la position et l'impulsion par les opérateurs correspondants dans l'expression (A.17). Cet opérateur hamiltonien peut se réécrire comme son analogue classique sous la forme

$$\hat{H} = \hat{H}_{\perp} + \hat{H}_{\parallel} \quad (\text{A.24})$$

avec

$$\hat{H}_{\perp} = \frac{(\hat{p}_x - qA_x)^2 + (\hat{p}_y - qA_y)^2}{2m} = \frac{1}{2}m(\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2) \quad (\text{A.25})$$

et

$$\hat{H}_{\parallel} = \frac{(\hat{p}_z - qA_z)^2}{2m} = \frac{1}{2}m\hat{v}_z^2. \quad (\text{A.26})$$

Lorsque  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ , les relations de commutation canoniques (A.1) entre les opérateurs impulsions et positions restent inchangées, de même que celles des opérateurs vitesse et position (A.6). Par contre, les relations de commutation entre les composantes de la vitesse se simplifient et nous avons

$$\begin{aligned} [\hat{v}_x, \hat{v}_z] &= [\hat{v}_y, \hat{v}_z] = 0 \\ [\hat{v}_x, \hat{v}_y] &= \frac{iq\hbar}{m^2} B = -i\frac{\hbar\omega_c}{m}. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Nous en déduisons que les écarts quadratiques moyens de  $\hat{v}_x$  et  $\hat{v}_y$  vérifient la relation d'incertitude [48]

$$\Delta v_x \Delta v_y \geq \frac{\hbar|\omega_c|}{2m}. \quad (\text{A.28})$$

À partir ces relations de commutation, il est possible de montrer que  $\hat{H}_\perp$  et  $\hat{H}_\parallel$  commutent et donc, que les valeurs propres de  $\hat{H}$  peuvent s'écrire sous la forme  $E = E_\perp + E_\parallel$  avec  $E_\perp$  et  $E_\parallel$  les valeurs propres de  $\hat{H}_\perp$  et  $\hat{H}_\parallel$  [48].

Nous pouvons définir les opérateurs positions du centre de la trajectoire circulaire par analogie avec les grandeurs classiques correspondantes (A.16) par [8, 48]

$$\hat{x}_0 = \hat{x} - \frac{\hat{v}_y}{\omega_c}, \quad \hat{y}_0 = \hat{y} + \frac{\hat{v}_x}{\omega_c}. \quad (\text{A.29})$$

Les opérateurs  $\hat{x}_0$  et  $\hat{y}_0$  commutent avec l'hamiltonien total  $\hat{H}$  et donnent lieu à des constantes du mouvement comme en mécanique classique. Cependant, ils ne commutent pas entre eux,

$$[\hat{x}_0, \hat{y}_0] = -\frac{i\hbar}{qB}, \quad (\text{A.30})$$

et il existe une relation d'incertitude entre  $\hat{x}_0$  et  $\hat{y}_0$  [8]

$$\Delta x_0 \Delta y_0 \geq \frac{\hbar}{2qB} \quad (\text{A.31})$$

où  $\Delta x_0$  et  $\Delta y_0$  sont les écarts quadratiques moyens des opérateurs correspondants. Ces deux opérateurs sont incompatibles et il est impossible de connaître simultanément ces deux grandeurs physiques avec une précision arbitrairement grande.

Afin de calculer les énergies propres et les états propres du système, il est nécessaire de fixer la jauge. Dans un premier temps, nous travaillons dans la jauge de Landau.

### Jauge de Landau

Dans cette jauge, le potentiel vecteur n'a qu'une composante non-nulle,  $\mathbf{A} = (-yB, 0, 0)$ , ce qui entraîne  $\hat{v}_y = \hat{p}_y/m$  et  $\hat{v}_z = \hat{p}_z/m$ . L'hamiltonien décrivant le mouvement parallèle au champ magnétique prend dès lors la forme  $\hat{H}_\parallel = \hat{p}_z^2/(2m)$  de l'hamiltonien d'une particule libre à une dimension. Cet hamiltonien admet pour vecteurs propres des ondes planes  $\langle z|p_z\rangle = \exp(ip_z z/\hbar)$  avec  $p_z \in \mathbb{R}$  et d'énergie propre  $E_\parallel = p_z^2/(2m)$ . Au global, les fonctions propres de  $\hat{H}$  peuvent s'écrire sous la forme [12]

$$\psi(x, y, z) = \psi_\perp(x, y) e^{ip_z z/\hbar} \quad (\text{A.32})$$

où  $\psi_\perp(x, y)$  est fonction propre de l'hamiltonien  $\hat{H}_\perp$ . Dans la jauge de Landau, l'hamiltonien  $\hat{H}_\perp$  prend la forme

$$\hat{H}_\perp = \frac{(\hat{p}_x + By)^2 + \hat{p}_y^2}{2m}. \quad (\text{A.33})$$

Comme l'hamiltonien (A.33) commute également avec l'opérateur  $\hat{p}_x$ , nous pouvons construire la fonction propre  $\psi_\perp(x, y)$  comme état propre commun des opérateurs  $\hat{H}_\perp$  et  $\hat{p}_x$ . Comme  $\langle x|p_x\rangle = \exp(ip_x x/\hbar)$  est état propre de l'opérateur  $\hat{p}_x$  de valeur propre  $p_x$ , nous pouvons écrire [8, 12]

$$\psi_\perp(x, y) = \phi(y) e^{ip_x x/\hbar}. \quad (\text{A.34})$$

En injectant cette expression dans l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\hat{H}_\perp \psi_\perp(x, y) = E_\perp \psi_\perp(x, y) \quad (\text{A.35})$$

et en remplaçant  $\hat{\mathbf{p}}$  par  $\hbar\nabla/i$ , nous obtenons [8, 12]

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (y - y_0)^2 \right] \phi(y) = E_\perp \phi(y) \quad (\text{A.36})$$

avec  $y_0 = -p_x/(qB)$  et  $\omega_c$  donné par (A.14). Cette équation est formellement identique à celle décrivant un oscillateur harmonique à une dimension [8, 12]. Nous en concluons que les valeurs permises de l'énergie sont

$$E_{\perp,n} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c \quad (\text{A.37})$$

avec  $n$  un entier positif ou nul. Les états propres correspondants sont donnés par

$$\phi_n(y) = \frac{1}{\pi^{1/4} \ell_m^{1/2} \sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{2\ell_m^2}} H_n\left(\frac{y-y_0}{\ell_m}\right) \quad (\text{A.38})$$

avec  $\ell_m = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}}$  la longueur magnétique et  $H_n(y)$  les polynômes d'Hermite [8, 12].

Au total, le spectre de l'hamiltonien global  $\hat{H}$  est donné par

$$E_{n,p_z} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + \frac{p_z^2}{2m} \quad (\text{A.39})$$

avec pour fonctions propres

$$\psi_{n,p_z}(x, y, z) = \frac{1}{\pi^{1/4} \ell_m^{1/2} \sqrt{2^n n!}} e^{-(y-y_0)^2/2\ell_m^2} H_n\left(\frac{y-y_0}{\ell_m}\right) e^{i(p_x x + p_z z)/\hbar} \quad (\text{A.40})$$

où  $n = 0, 1, 2, \dots$  et  $p_z \in \mathbb{R}$ . Les niveaux d'énergie (A.39) sont appelés niveaux de Landau. Les densités  $|\psi_{n,p_z}|^2$  et courants de probabilité de présence  $\mathbf{j}$  (éq. (1.28)) associées aux niveaux de Landau sont illustrées sur la figure A.1. Nous constatons que les densités et courants de probabilité de présence sont importants dans les mêmes régions de l'espace. Les courants de probabilités sont parallèles à la direction  $\mathbf{e}_x$  et sont dirigés vers la droite lorsque  $y < 0$  et vers la gauche lorsque  $y > 0$ . Remarquons que dans cette jauge, la composante  $y$  de l'opérateur position du centre de la trajectoire circulaire s'écrit

$$\hat{y}_0 = -\frac{\hat{p}_x}{qB}. \quad (\text{A.41})$$

Les états propres (A.40), fonctions propres de  $\hat{p}_x$ , sont donc aussi états propres de l'opérateur  $\hat{y}_0$  de valeur propre  $y_0 = -p_x/(qB)$ . Ce résultat permet de comprendre la forme de la fonction d'onde. La dépendance en  $x$  de la fonction d'onde apparaît au travers d'une onde plane et  $\psi_{n,p_z}(\mathbf{r})$  est complètement délocalisé dans cette direction. Cela peut se comprendre au vu de l'inégalité (A.31). En effet, comme  $\psi_{n,p_z}(\mathbf{r})$  est une fonction propre de  $\hat{y}_0$ ,  $\Delta y_0$  est nul et nous n'avons aucune information sur la position  $x_0$  ( $\Delta x_0 = \infty$ ). De plus, ce résultat illustre bien le caractère non-intuitif de l'opérateur impulsion  $\hat{\mathbf{p}}$  en présence d'un champ magnétique. Nous constatons ici que l'opérateur  $\hat{p}_x$  ne représente pas une composante de la quantité de mouvement mais est lié à la composante  $y$  de la position [8].

Comme le spectre en énergie (A.39) ne fait pas intervenir la valeur propre  $p_x \in \mathbb{R}$  apparaissant dans l'expression (A.40) des vecteurs propres, les niveaux d'énergie sont infiniment continûment dégénérés [12]. Néanmoins, le degré de dégénérescence peut être rendu fini en restreignant dans le plan  $x - y$  le mouvement de la particule chargée à une région rectangulaire grande mais finie de surface  $S = L_x L_y$ . Dans cette situation, le nombre de valeurs discrètes permises de  $p_x$  dans un intervalle  $\Delta p_x$  vaut  $L_x \Delta p_x / (2\pi\hbar)$  [12]. Toutes les valeurs de  $p_x$  qui conduisent à une position du centre d'orbite  $y_0 = -p_x/(qB)$  dans la surface  $S$  sont permises (le rayon de la trajectoire circulaire est ici négligé par rapport à  $L_y$  supposé grand), ce qui conduit à la condition

$$0 < y_0 < L_y \quad (\text{A.42})$$

qui donne à  $\Delta p_x = qBL_y$ . Par conséquent, le nombre d'états pour  $n$  et  $p_z$  donné vaut  $qBS/(2\pi\hbar)$  [12].

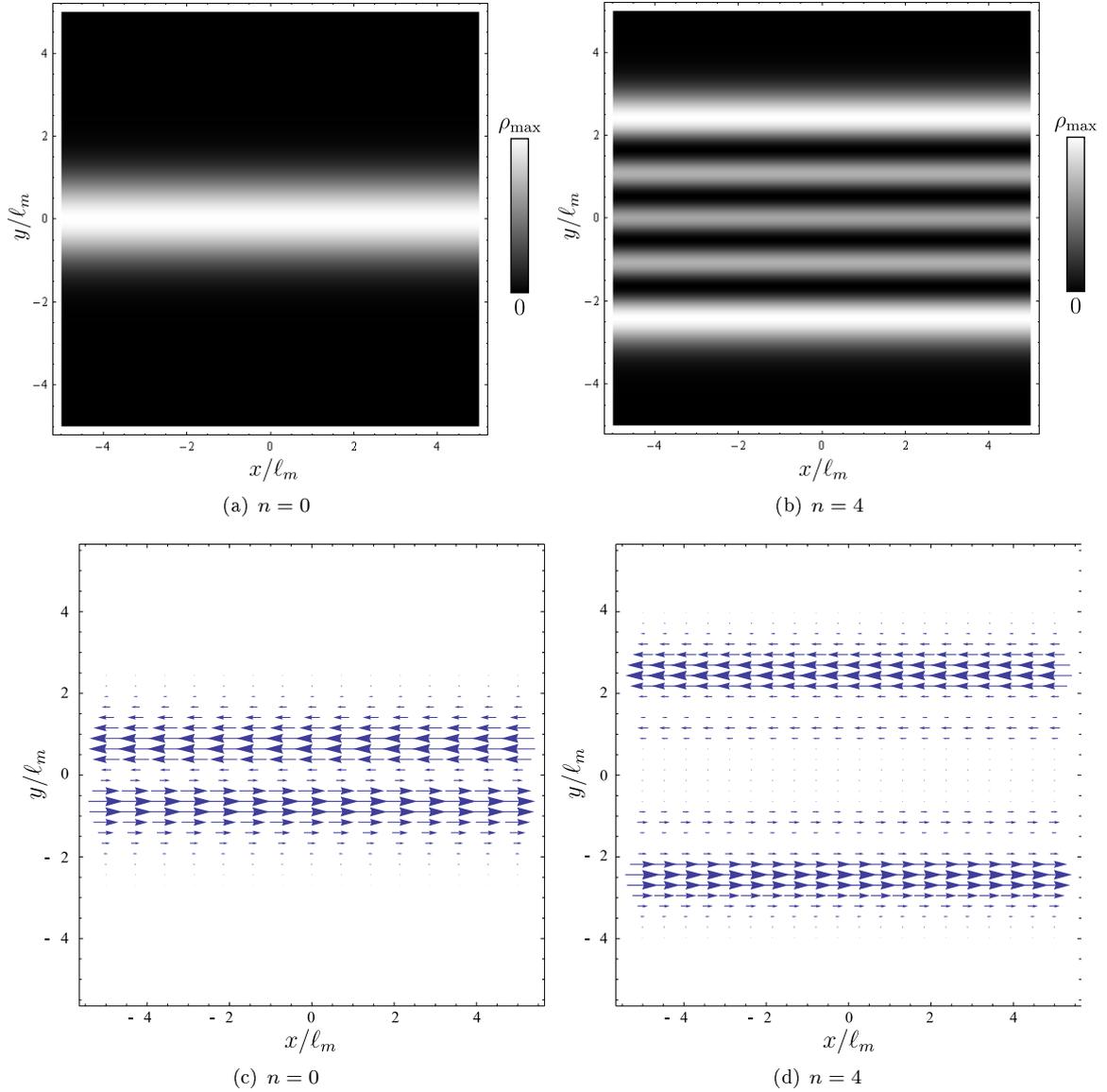


FIGURE A.1 – (a) et (b) Densités de probabilité de présence des niveaux de Landau  $n = 0$  et  $n = 4$  dans le plan  $x - y$ . Ces densités de probabilité sont invariantes par translation dans la direction  $\mathbf{e}_x$ . (c) et (d) Densités de courant de probabilité de présence des niveaux de Landau  $n = 0$  et  $n = 4$  dans le plan  $x - y$ .

### Jauge axiale

Nous allons maintenant chercher les énergies et fonctions propres de l'hamiltonien  $\hat{H}$  (éq. (A.24)) en se plaçant dans la jauge axiale. Dans cette jauge, le potentiel vecteur vaut  $\mathbf{A} = (\mathbf{B} \times \mathbf{r})/2 = (-By/2, Bx/2, 0)$ . Remarquons de suite que l'hamiltonien  $\hat{H}_{\parallel}$  (éq. (A.26)) est le même qu'en jauge de Landau et les énergies propres et fonctions propres associées sont respectivement données par les expressions  $E_{\parallel} = p_z^2/(2m)$  et  $\langle z|p_z\rangle = \exp(ip_z z/\hbar)$ . Nous allons donc nous concentrer uniquement sur

l'hamiltonien  $\hat{H}_\perp$  (éq. (A.26)). Dans la jauge axiale,  $\hat{H}_\perp$  prend la forme [48]

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_\perp &= \frac{(\hat{p}_x - qA_x)^2 + (\hat{p}_y - qA_y)^2}{2m} \\
 &= \frac{1}{2}m \left[ \left( \frac{\hat{p}_x}{m} - \frac{\omega_c}{2}\hat{y} \right)^2 + \left( \frac{\hat{p}_y}{m} + \frac{\omega_c}{2}\hat{x} \right)^2 \right] \\
 &= \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega_c^2}{8}(\hat{x}^2 + \hat{y}^2) + \frac{\omega_c}{2}(\hat{p}_y\hat{x} - \hat{p}_x\hat{y}) \\
 &= \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega_c^2}{8}(\hat{x}^2 + \hat{y}^2) + \frac{\omega_c}{2}\hat{L}_z \\
 &= \hat{H}_{xy} + \frac{\omega_c}{2}\hat{L}_z
 \end{aligned} \tag{A.43}$$

où  $\omega_c$  est donné par l'éq. (A.14),  $\hat{L}_z$  est la composante  $z$  de l'opérateur de moment cinétique orbital  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$  et  $\hat{H}_{xy}$  est l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique à deux dimensions isotrope de fréquence  $\omega = \omega_c/2$ . Les opérateurs  $\hat{H}_{xy}$  et  $\hat{L}_z$  forment un E.C.O.C.<sup>2</sup> et les vecteurs propres de  $\hat{H}_\perp$  sont les vecteurs propres communs de  $\hat{H}_{xy}$  et  $\hat{L}_z$  que nous allons maintenant construire.

L'hamiltonien  $\hat{H}_{xy}$  peut s'écrire sous la forme  $\hat{H}_{xy} = \hat{H}_x + \hat{H}_y$  avec

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_x &= \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x} \\
 \hat{H}_y &= \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{y}.
 \end{aligned} \tag{A.44}$$

$\hat{H}_x$  et  $\hat{H}_y$  sont deux hamiltoniens d'oscillateur harmonique à une dimension indépendants. Si les vecteurs  $|n_x\rangle$  (respectivement  $|n_y\rangle$ ) forment une base d'états propres de  $\hat{H}_x$  ( $\hat{H}_y$ ), les états

$$|n_x, n_y\rangle = |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle \tag{A.45}$$

forment une base d'état propre de  $\hat{H}_{xy}$  [48]. Il est commode d'introduire les opérateurs  $\hat{a}_x$  et  $\hat{a}_y$  d'annihilation d'un quantum d'énergie relatif aux mouvements d'oscillation selon  $x$  et  $y$  respectivement,

$$\begin{aligned}
 \hat{a}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \hat{x} & i\hat{p}_x \\ x_0 & p_0 \end{pmatrix} \\
 \hat{a}_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \hat{y} & i\hat{p}_y \\ x_0 & p_0 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{A.46}$$

où  $x_0 = \ell_m$  et  $p_0 = \hbar/\ell_m$ . La seule relation de commutation non-nulle est

$$[\hat{a}_x, \hat{a}_x^\dagger] = [\hat{a}_y, \hat{a}_y^\dagger] = 1. \tag{A.47}$$

Définissons les opérateurs nombres de quanta  $\hat{n}_x = \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x$  et  $\hat{n}_y = \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y$  qui sont tels que

$$\hat{n}_\alpha |n_\alpha\rangle = n_\alpha |n_\alpha\rangle \tag{A.48}$$

où  $n_\alpha \in \mathbb{R}$  et  $\alpha = x, y$ . Dès lors, il est possible de réécrire l'hamiltonien sous la forme

$$\hat{H}_{xy} = \hbar\omega(\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y + 1). \tag{A.49}$$

---

2. Un ensemble complet d'opérateurs qui commutent (E.C.O.C.) est un ensemble d'opérateurs :

- qui commutent deux à deux ;
- pour lesquels il existe une seule base orthonormée de vecteurs propres communs à tous les opérateurs.

Dans ces conditions, la donnée des valeurs propres de tous les opérateurs est suffisante à déterminer de manière univoque un vecteur propre commun unique [48].

Les énergies propres du système sont données par

$$E_{xy} = \hbar\omega(n_x + n_y + 1) \quad (\text{A.50})$$

et les états propres correspondants sont obtenus à partir de l'état fondamental par la relation

$$|n_x, n_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x!n_y!}} (\hat{a}_x^\dagger)^{n_x} (\hat{a}_y^\dagger)^{n_y} |0, 0\rangle. \quad (\text{A.51})$$

L'état  $|0, 0\rangle$  est obtenu en résolvant les équations  $\hat{a}_x|n_x = 0\rangle = 0$  et  $\hat{a}_y|n_y = 0\rangle = 0$ . On voit de suite que les niveaux d'énergie  $E_{xy}$  sont dégénérés car il existe plusieurs combinaisons des nombres  $n_x$  et  $n_y$  qui donnent la même énergie et donc  $\hat{H}_{xy}$  ne forme pas un E.C.O.C. [48]. L'opérateur  $\hat{L}_z$  exprimé en fonction des opérateurs d'annihilation et de création s'écrit

$$\hat{L}_z = i\hbar (\hat{a}_y^\dagger \hat{a}_x - \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y). \quad (\text{A.52})$$

Remarquons que les opérateurs  $\hat{H}_{xy}$  et  $\hat{L}_z$  commutent. Définissons les opérateurs d'annihilation de quanta circulaires droit et gauche  $\hat{a}_d$  et  $\hat{a}_g$ ,

$$\begin{aligned} \hat{a}_d &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_x - i\hat{a}_y) \\ \hat{a}_g &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_x + i\hat{a}_y). \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

La seule relation de commutation non-nulle est

$$[\hat{a}_d, \hat{a}_d^\dagger] = [\hat{a}_g, \hat{a}_g^\dagger] = 1. \quad (\text{A.54})$$

De plus les opérateurs nombre de quanta  $\hat{n}_d = \hat{a}_d^\dagger \hat{a}_d$  et  $\hat{n}_g = \hat{a}_g^\dagger \hat{a}_g$  associés permettent d'écrire [48]

$$\begin{aligned} \hat{H}_{xy} &= \hbar\omega(\hat{n}_d + \hat{n}_g + 1) \\ \hat{L}_z &= \hbar(\hat{n}_d - \hat{n}_g). \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

Ces deux opérateurs admettent comme valeurs propres

$$\begin{aligned} E_{xy} &= \hbar\omega(n_d + n_g + 1) = \hbar\omega(n + 1) \\ L_z &= \hbar(n_d - n_g) = \hbar m \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

avec  $n_d$  et  $n_g$  des nombres entiers positifs ou nuls et  $n = n_d + n_g$  et  $m = n_d - n_g$ . Les vecteurs propres communs correspondants sont

$$|n_d, n_g\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_d!n_g!}} (\hat{a}_d^\dagger)^{n_d} (\hat{a}_g^\dagger)^{n_g} |0, 0\rangle. \quad (\text{A.57})$$

L'effet de l'opérateur  $\hat{a}_d^\dagger$  est d'augmenter l'énergie de  $\hbar\omega$  et d'augmenter le moment cinétique de  $\hbar$  alors que l'opérateur  $\hat{a}_g^\dagger$  augmente de la même manière l'énergie mais réduit le moment cinétique de  $\hbar$ . La donnée de  $n$  et  $m$  est équivalente à la donnée de  $n_d$  et  $n_g$  et détermine de manière univoque la base d'états propres communs. Il s'en suit que  $\hat{H}_{xy}$  et  $\hat{L}_z$  forment un E.C.O.C. [48].

Revenons au calcul des énergies et fonctions propres de  $\hat{H}_\perp$ . En utilisant l'expression des opérateurs  $\hat{H}_{xy}$  et  $\hat{L}_z$  en fonction de  $\hat{n}_d$  et  $\hat{n}_g$ , nous obtenons

$$\begin{aligned} \hat{H}_\perp &= \hat{H}_{xy} + \frac{\omega_c}{2} \hat{L}_z \\ &= \hbar\omega_c \left( \hat{n}_d + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.58})$$

Les vecteurs  $|n_d, n_g\rangle$  sont donc bien vecteurs propres de  $\hat{H}_\perp$  de valeur propre

$$E_\perp = \hbar\omega_c \left( n_d + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{A.59})$$

où  $n_d$  est un entier positif ou nul. Les états propres  $|n_d, n_g\rangle$  sont illustrés sur la figure A.2. Nous retrouvons comme il se doit le même spectre en énergie que dans la jauge de Landau. Comme les énergies propres  $E_\perp$  ne dépendent pas de  $n_g$ , les niveaux d'énergie sont infiniment dégénérés [48]. Néanmoins, la composante  $z$  du moment cinétique permet de classer ces états de même énergie.

Il est possible de montrer que l'opérateur associé au carré du rayon de la trajectoire classique (A.21)  $\hat{R}^2 = (\hat{x} - \hat{x}_0)^2 + (\hat{y} - \hat{y}_0)^2$  prend la forme

$$\hat{R}^2 = \frac{2}{m\omega_c^2} \hat{H}_\perp \quad (\text{A.60})$$

identique à celle de la grandeur classique correspondante. Il s'ensuit que  $\hat{R}^2$  est une quantité conservée. De même, l'opérateur  $\hat{\theta}_z$ , associé à la composante  $z$  du moment de quantité de mouvement calculé par rapport au centre de la trajectoire circulaire dans le plan  $x - y$ , obéit à la même relation (A.23) que son homologue classique et est aussi une quantité conservée [48]. Enfin, définissons l'opérateur  $\hat{r}_0^2$  correspondant au carré de la distance entre le centre de la trajectoire classique dans le plan  $x - y$  et l'origine du système de référence. Cet opérateur vaut

$$\hat{r}_0^2 = \hat{x}_0^2 + \hat{y}_0^2. \quad (\text{A.61})$$

Il est possible de montrer que [48]

$$\hat{r}_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega_c} (\hat{n}_g + 1). \quad (\text{A.62})$$

Les vecteurs  $|n_d, n_g\rangle$  sont également états propres de  $\hat{r}_0^2$  de valeur propre  $\hbar(n_g + 1)/(m\omega_c)$ . L'impossibilité d'annuler cette valeur vient du fait que  $[\hat{x}_0, \hat{y}_0] \neq 0$  [48].

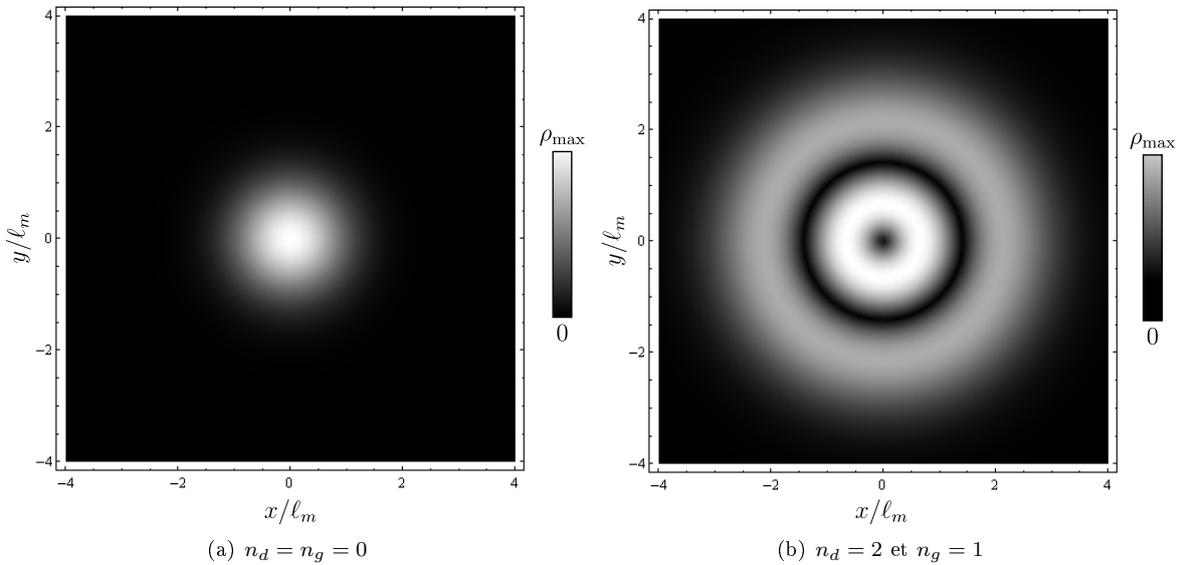


FIGURE A.2 – Densités de probabilité de présence associées aux états propres  $|n_d = 0, n_g = 0\rangle$  et  $|n_d = 2, n_g = 1\rangle$  de  $\hat{H}_\perp$ .

## A.3 Champ électrique uniforme

### A.3.1 Traitement classique

Nous allons à présent étudier le mouvement d'une particule chargée dans un champ électrique uniforme  $\mathbf{E} = E_0 \mathbf{e}_x$ . Dans cette situation, la force de Lorentz (1.2) se ramène à  $\mathbf{F} = qE_0 \mathbf{e}_x$  et les équations du mouvement admettent comme solution [49]

$$\begin{cases} x(t) = x_0 + v_{0,x}t + \frac{qE_0}{2m}t^2 \\ y(t) = y_0 + v_{0,y}t \\ z(t) = z_0 + v_{0,z}t \end{cases} \quad (\text{A.63})$$

avec  $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$  et  $\mathbf{v}_0 = (v_{0,x}, v_{0,y}, v_{0,z})$  la position et la vitesse initiales de la particule. Cette solution correspond à un mouvement uniformément accéléré dans la direction parallèle au champ électrique et à un mouvement à vitesse constante dans les autres directions.

L'hamiltonien du système est donné par l'expression (1.10) dans laquelle les potentiels scalaire et vecteur sont choisis de manière à correspondre à un champ électrique constant. Un tel champ électrique peut notamment être obtenu à partir des deux choix de jauge suivants [49]

$$\phi(\mathbf{r}, t) = -E_0x \text{ et } \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{A.64})$$

et

$$\phi'(\mathbf{r}, t) = 0 \text{ et } \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = -E_0 \mathbf{e}_x t. \quad (\text{A.65})$$

Les potentiels  $(\phi, \mathbf{A})$  et  $(\phi', \mathbf{A}')$  sont reliés entre eux par une transformation de jauge (1.21) avec pour fonction de jauge  $\chi(\mathbf{r}, t) = -E_0xt$ .

### A.3.2 Traitement quantique

Afin de déterminer la dynamique quantique d'une particule chargée plongée dans un champ électrique uniforme, considérons l'équation de Schrödinger [49]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A.66})$$

où  $\hat{H}$  est l'hamiltonien du système dans la jauge (A.64) et est donné par

$$\hat{H} = \left( \frac{\hat{p}_x^2}{2m} - qE_0x \right) + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \quad (\text{A.67})$$

avec  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ . Comme l'hamiltonien  $\hat{H}$  commute avec les opérateurs  $\hat{p}_y$  et  $\hat{p}_z$ , la solution peut s'écrire sous la forme

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(x, t) e^{i(p_y y - p_y^2 t / 2m) / \hbar} e^{i(p_z z - p_z^2 t / 2m) / \hbar} \quad (\text{A.68})$$

où la dépendance en  $y$  et  $z$  est celle d'une onde plane qui est l'analogie quantique du mouvement classique à vitesse constante. Il reste donc à trouver la dépendance en  $x$  de la fonction d'onde. Dans ce but, il faut résoudre l'équation de Schrödinger à une dimension

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left( \frac{\hat{p}_x^2}{2m} - qE_0x \right) \psi(x, t) \quad (\text{A.69})$$

Ce problème correspond à celui d'une particule uniformément accélérée. Il se résout aisément en utilisant la représentation  $|\mathbf{p}\rangle$ . Si au départ, la fonction d'onde  $\psi(x, 0)$  est un paquet d'ondes gaussien,

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\beta\sqrt{\pi}}} e^{-x^2/2\beta^2} \quad (\text{A.70})$$

avec  $\beta$  l'écart-type de la gaussienne, son évolution temporelle est donnée par [49]

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\beta\sqrt{\pi}(1 + i\frac{t}{t_0})}} \exp\left(iqE_0\frac{x - qE_0t^2}{6m\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x - qE_0t^2/2m)^2}{2\beta^2(1 + it/t_0)}\right). \quad (\text{A.71})$$

où  $t_0 = m\beta^2/\hbar$  est le temps caractéristique d'étalement de la fonction d'onde. La densité de probabilité  $|\psi(x, t)|^2$  est représentée sur la figure (A.3). Il est possible de montrer que la valeur moyenne de

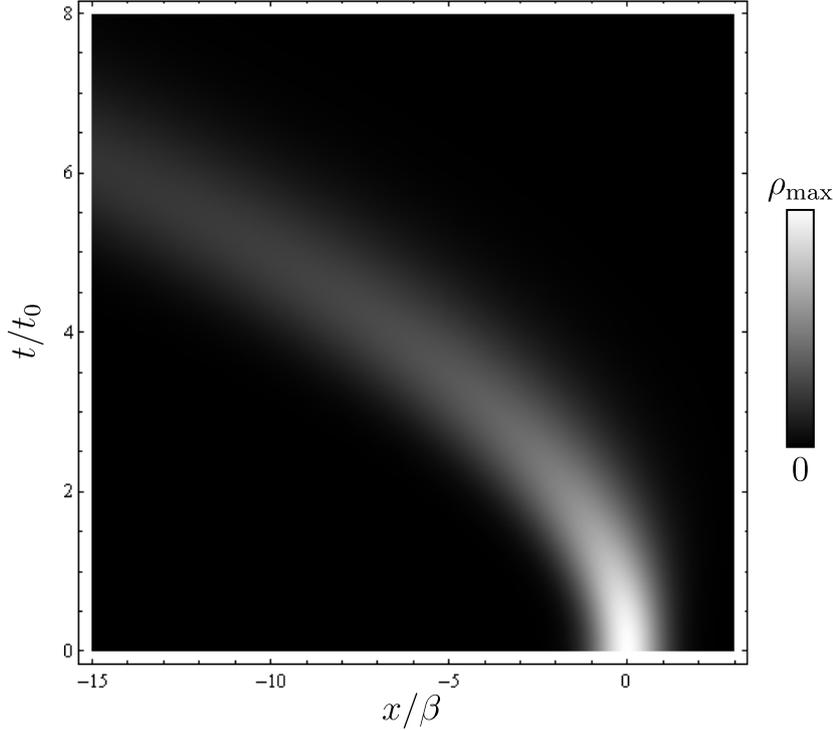


FIGURE A.3 – Densité de probabilité de présence associée à la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  en fonction de la position et du temps dans le cas d'une particule de charge négative et d'un champ électrique dirigé selon  $\mathbf{e}_x$ . Remarquons que la densité de probabilité trace une parabole dans le plan  $x - t$ .

l'impulsion dans cet état au temps  $t$  suit la relation [49]

$$\langle \hat{p} \rangle_t = \langle \hat{p} \rangle_0 + qE_0t \quad (\text{A.72})$$

ce qui correspond au résultat classique. De même, si le paquet d'ondes gaussien est initialement centré en  $x_0 = 0$ , la valeur moyenne de la position au temps  $t$  est donnée par [49]

$$\langle \hat{x} \rangle_t = \frac{qE_0t^2}{2m} \quad (\text{A.73})$$

qui de nouveau correspond au résultat classique.

Considérons à présent le même problème dans la jauge (A.65). Dans cette jauge, l'hamiltonien commute toujours avec les opérateurs  $\hat{p}_y$  et  $\hat{p}_z$  et la dépendance en  $y$  et en  $z$  est la même que précédemment. Il reste à résoudre l'équation de Schrödinger à une dimension

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(x, t) &= \frac{(\hat{p}_x + qE_0t)^2}{2m} \psi'(x, t) \\ &= \left( \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{qE_0t\hat{p}_x}{m} + \frac{(qE_0t)^2}{2m} \right) \psi'(x, t) \\ &= (\hat{H}_0 + \hat{H}_1t + \hat{H}_2t^2) \psi'(x, t). \end{aligned} \quad (\text{A.74})$$

Cette équation peut être résolue en intégrant par rapport au temps. Nous obtenons [49]

$$\psi'(x, t) = e^{-i(\hat{H}_0 t + \hat{H}_1 t^2/2 + \hat{H}_2 t^3/3)/\hbar} \psi'(x, 0). \quad (\text{A.75})$$

Comme  $\hat{H}_0$ ,  $\hat{H}_1$  et  $\hat{H}_2$  commutent entre eux, il est possible de réécrire la fonction d'onde sous la forme

$$\psi'(x, t) = e^{-i(\frac{qE_0}{6m}t^3)/\hbar} e^{-i(\frac{qE_0 t^2 \hat{p}_x}{2m})/\hbar} e^{-\mathcal{B}(\frac{\hat{p}_x^2 t}{2m})/\hbar} \psi'(x, 0). \quad (\text{A.76})$$

Afin de résoudre ce problème, considérons l'action successive des trois opérateurs pour un état initial gaussien (A.70). L'application de  $\exp(-i\hat{p}_x^2 t/2m\hbar)$  donne [49]

$$\psi'_0(x, t) = e^{-i\hat{p}_x^2 t/2m\hbar} \frac{1}{\sqrt{\beta}\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\beta^2}} = \frac{1}{\sqrt{\beta}\sqrt{\pi}(1+i\frac{t}{t_0})} e^{-x^2/2\beta^2(1+it/t_0)} \quad (\text{A.77})$$

correspondant à un étalement du paquet d'ondes mais pas à une translation. L'effet du second opérateur est obtenu en se souvenant que l'opérateur  $\hat{\mathbf{p}}$  génère les translations dans l'espace [8]. Son effet est de traduire le paquet d'ondes  $\psi'_0$  selon [49]

$$x \rightarrow x - \frac{qE_0 t^2}{2m}. \quad (\text{A.78})$$

Le dernier terme  $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{qE_0}{6m}t^3\right)\right)$  constitue simplement un facteur de phase. Au total, la fonction d'onde du système est donnée par [49]

$$\psi'(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\beta}\sqrt{\pi}(1+i\frac{t}{t_0})} e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{qE_0}{6m}t^3\right)} \exp\left(-\left(x - \frac{qE_0 t^2}{2m}\right)^2/2\beta^2(1+it/t_0)\right) \quad (\text{A.79})$$

Il est aisé de vérifier que les solutions  $\psi(x, t)$  et  $\psi'(x, t)$  calculés dans les jauges (A.64) et (A.65) sont reliées par la transformation de jauge (1.21)

$$\psi'(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\chi(\mathbf{r}, t)} \psi(x, t) \quad (\text{A.80})$$

avec  $\chi(\mathbf{r}, t) = -E_0 x t$ .



# Bibliographie

- [1] R. P. Feynman, International Journal of Theoretical Physics **21**, 467 (1982).
- [2] I. Buluta et F. Nori, Science **326**, 108 (2009).
- [3] R. Blatt et C. F. Roos, Nature Physics **8**, 277 (2012).
- [4] M. Hor-Meyll et al., Phys. Rev. A **80**, 042327 (2009).
- [5] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damskic, et S. A. U. Send, Adv. Phys. **56**, 243 (2007).
- [6] A. D. Greentree, C. Tahan, J. H. Cole, et L. C. L. Hollenberg, Nature Physics **2**, 856 (2006).
- [7] L. D. Landau et E. M. Lifshitz, *The Classical Theory of Fields : Volume 2*, Course of Theoretical Physics Series, Pergamon Press, 1975.
- [8] L. Ballentine, *Quantum Mechanics : A Modern Development*, World Scientific, 1998.
- [9] M. O. Scully et S. Zubairy, *Quantum Optics*, Cambridge University Press, 1997.
- [10] D. Griffiths, *Introduction to Elementary Particles*, Physics Textbook, Wiley, 2008.
- [11] B. Berche et E. Medina, European Journal of Physics **34**, 161 (2013).
- [12] L. D. Landau et E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics : Non-Relativistic Theory*, Teoreticheskaia fizika (Izd. 3-e) (Landau, L. D, 1908-1968), Butterworth-Heinemann, 1977.
- [13] J. J. Sakurai et J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 2010.
- [14] M. E. Peskin et D. V. Schroeder, *An Introduction To Quantum Field Theory*, Advanced Book Program, Addison-Wesley Publishing Company, 1995.
- [15] D. Griffiths, *Introduction to quantum mechanics*, Pearson Prentice Hall, 2005.
- [16] A. Messiah, *Mécanique quantique, vol. 2*, Dunod, 1960.
- [17] M. V. Berry, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences **392**, 45 (1984).
- [18] B. R. Holstein, American Journal of Physics **57**, 1079 (1989).
- [19] C. A. Mead et D. G. Truhlar, J. Chem. Phys. **70**, 2284 (1979).
- [20] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, et G. Grynberg, *Photons et atomes : introduction à l'électrodynamique quantique*, Savoirs actuels. Série Physique, EDP Sciences, 2001.
- [21] S. A. Gardiner, *Quantum Measurement, Quantum Chaos, and Bose-Einstein Condensates*, Thèse de doctorat, Leopold-Franzens-Universität Innsbruck, 2000.
- [22] J. Dalibard, F. Gerbier, G. Juzeliūnas, et P. Öhberg, Rev. Mod. Phys. **83**, 1523 (2011).
- [23] G. Grynberg, A. Aspect, C. Fabre, et C. Cohen-Tannoudji, *Introduction to Quantum Optics : From the Semi-classical Approach to Quantized Light*, Cambridge University Press, 2010.
- [24] K. Bergmann, H. Theuer, et B. W. Shore, Rev. Mod. Phys. **70**, 1003 (1998).
- [25] V. Bretin, S. Stock, Y. Seurin, et J. Dalibard, Phys. Rev. Lett. **92**, 050403 (2004).
- [26] N. R. Cooper, Advances in Physics **57**, 539 (2008).

- 
- [27] M. Cheneau et al., Europhysics Letters **83**, 60001 (2008).
- [28] P. M. Visser et G. Nienhuis, Phys. Rev. A **57**, 4581 (1998).
- [29] G. Juzeliūnas, P. Öhberg, J. Ruseckas, et A. Klein, Phys. Rev. A **71**, 053614 (2005).
- [30] G. Juzeliūnas, J. Ruseckas, P. Öhberg, et M. Fleischhauer, Phys. Rev. A **73**, 025602 (2006).
- [31] Y. J. Lin et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 130401 (2009).
- [32] Y. J. Lin et al., Nature Physics **7**, 531 (2011).
- [33] Y. J. Lin, R. L. Compton, K. Jiménez-García, J. V. Porto, et I. B. Spielman, Nature **462**, 628 (2009).
- [34] K. Osterloh, M. Baig, L. Santos, P. Zoller, et M. Lewenstein, Phys. Rev. Lett. **95**, 010403 (2005).
- [35] J. Struck et al., Phys. Rev. Lett. **108**, 225304 (2012).
- [36] A. L. Fetter, Rev. Mod. Phys. **81**, 647 (2009).
- [37] L. D. Landau et E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics : mechanics*, Course of Theoretical Physics, Pergamon Press, 1976.
- [38] L. D. Landau et E. M. Lifshitz, *Statistical Physics, Third Edition, Part 1 : Volume 5 (Course of Theoretical Physics, Volume 5)*, Butterworth-Heinemann, 1980.
- [39] P. Zhang, Y. Li, et C. P. Sun, European Physical Journal D **36**, 229 (2005).
- [40] J. Ruseckas, G. Juzeliūnas, P. Öhberg, et M. Fleischhauer, Phys. Rev. Lett. **95**, 010404 (2005).
- [41] I. B. Spielman, Phys. Rev. A **79**, 063613 (2009).
- [42] M. Saffman, T. G. Walker, et K. Mølmer, Rev. Mod. Phys. **82**, 2313 (2010).
- [43] A. Gaëtan et al., Nature Physics **5**, 115 (2009).
- [44] A. Reinhard, T. C. Liebisch, B. Knuffman, et G. Raithel, Phys. Rev. A **75**, 032712 (2007).
- [45] J. Gillet, G. S. Agarwal, et T. Bastin, Phys. Rev. A **81**, 013837 (2010).
- [46] T. G. Walker et M. Saffman, Advances in Atomic Molecular and Optical Physics **61**, 81 (2012).
- [47] V. Paulisch, R. Han, H. Khoon Ng, et B. G. Englert, arXiv :1209.6568 .
- [48] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, et F. Laloë, *Mécanique quantique, vol. 1*, Collection Enseignement des sciences, Hermann, 1973.
- [49] R. Robinett, *Quantum Mechanics : Classical Results, Modern Systems, and Visualized Examples*, Oxford University Press, USA, 2006.