

## Partie à dominante physique

### Des spectromètres de masse aux premiers ordinateurs quantiques, l'aventure des pièges radio-fréquences

En 1989, Wolfgang Paul et Hans Dehmelt se partageaient le moitié du prix Nobel de physique pour le développement des pièges à ions. Dans le cas du piège de Paul, ce prix récompense une découverte qui date de 1954, et qui permet depuis d'observer des particules pendant une très longue durée, et donc de réaliser des observations et des manipulations très précises. Dans sa leçon délivrée lors de la remise du prix Nobel (Rev. Mod. Phys. **62** (1990) 531), Wolfgang Paul insiste sur la possibilité offerte par ses pièges d'observer des particules uniques, ce qui ouvrait une nouvelle ère pour la mesure en physique atomique, restreinte jusque là à des mesures sur des ensembles. En effet, la première observation "à l'oeil nu" d'un atome unique date de 1980 et était l'observation d'un ion unique piégé en piège de Paul (Neuhauser *et al.*, Phys. Rev. A **22** (1980) 1137). Nous vous proposons ici d'aborder les principes fondamentaux mis en jeu dans différentes applications de ces pièges. La partie II du problème qui suit peut être abordée sans que toutes les questions de la partie I aient trouvé une solution.

#### Données

Charge élémentaire $e$	$1,60 \times 10^{-19}$ C
Masse d'un électron $m_e$	$9,11 \times 10^{-31}$ kg
unité de masse atomique $u$	$1,66 \times 10^{-27}$ kg
Masse d'un atome de mercure, isotope 199 $m_{Hg}$	$3,21 \times 10^{-25}$ kg
Masse d'un atome de calcium, isotope 40 $m_{Ca}$	$6,68 \times 10^{-26}$ kg
Constante de Planck $h = 2\pi\hbar$	$6,63 \times 10^{-34}$ J.s
Constante de Boltzmann $k_B$	$1,38 \times 10^{-23}$ J.K <sup>-1</sup>
Permittivité diélectrique du vide $\epsilon_0$	$8,85 \times 10^{-12}$ F.m <sup>-1</sup>

#### Formules

— propriétés des opérateurs de dérivation dans l'espace :

$$\operatorname{div}(\mathbf{grad}U) = \Delta U \tag{1}$$

— Laplacien en coordonnées cartésiennes d'une fonction  $f(x, y, z)$  :

$$\Delta f = \frac{\partial^2 f(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f(x, y, z)}{\partial z^2} \quad (2)$$

— Laplacien en coordonnées sphériques d'une fonction  $f$  qui ne dépend que de  $r$  :

$$\Delta f = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \times \frac{df(r)}{dr} \right) = \frac{2}{r} \frac{df(r)}{dr} + \frac{d^2 f(r)}{dr^2} \quad (3)$$

— gradient en coordonnées sphériques d'une fonction  $f$  qui ne dépend que de  $r$  :

$$\mathbf{grad}(f(r)) = \frac{df}{dr} \mathbf{u}_r \quad (4)$$

Les vecteurs sont notés en **gras** dans tout le sujet.

— notation pour les dérivées temporelles :

$$\dot{f}(t) = \frac{df(t)}{dt} \quad (5)$$

— développement limité à l'ordre 2 en  $x \simeq 0$

$$\ln(1 + x) = x - \frac{x^2}{2} \quad (6)$$

## Partie I : Confinement et guidage de particules chargées par des potentiels oscillant

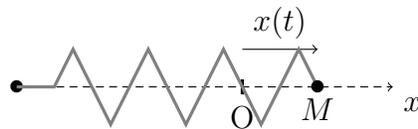


FIGURE 1 – Particule élastiquement liée à un point fixe

Une particule notée  $M$  est reliée élastiquement à un point fixe via un ressort de longueur à vide  $l_0$  et de raideur  $k$  comme représenté sur la figure 1.

1. Dans un premier temps, la particule est astreinte à se déplacer selon l'axe  $(Ox)$  horizontal. L'origine  $O$  est placée au niveau de la position d'équilibre du point  $M$ . Rappeler l'expression de la force de rappel élastique notée  $\mathbf{F}_{\text{él}}$ . En déduire l'expression de l'énergie potentielle élastique notée  $E_{\text{p,él}}(x)$  associée.

Avec ces notations, l'extension du ressort est  $x = l - l_0$ .

La force de rappel est alors :  $\mathbf{F}_{\text{él}} = -kx\mathbf{u}_x$

La force de rappel est telle que  $\mathbf{F}_{\text{él}} = -\mathbf{grad}(kx^2/2)$  donc  $E_{\text{p,él}}(x) = kx^2/2$

2. Obtenir l'équation du mouvement vérifiée par la position  $x(t)$  du point  $M$  et définir la pulsation propre notée  $\omega_0$ . Quelle est la forme des solutions avec les conditions initiales suivantes  $x(0) = x_0$  et  $\dot{x}(0) = 0$  ?

La projection de l'équation de la dynamique  $m\mathbf{a} = \mathbf{F}$  sur l'axe horizontal  $Ox$  se réduit à  $m\ddot{x}(t) = -kx(t)$  soit,

$$\ddot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) = 0$$

avec  $\omega_0^2 = k/m$ .

Les solutions sont de la forme

$$x(t) = A \cos(\omega_0 t) + B \sin(\omega_0 t).$$

Avec cette forme  $\dot{x} = -A\omega_0 \sin(\omega_0 t) + B\omega_0 \cos(\omega_0 t)$ . Les conditions initiales sont telles que  $\dot{x}(0) = B\omega_0$  donc  $\dot{x}(0) = 0$  impose  $B = 0$ . On a alors  $x(0) = A = x_0$ . La solution qui obéit aux conditions initiales est donc

$$x(t) = x_0 \cos(\omega_0 t)$$

3. Donner un autre exemple de système physique qui vérifie une telle équation différentielle en précisant la pulsation propre et la grandeur physique qui vérifie l'équation.

Pendule oscillant avec une masse au bout d'une corde non pesante et de longueur  $l$ , la grandeur oscillante est l'angle entre la corde et la verticale locale. Elle oscille à la pulsation  $\omega_0 = \sqrt{g/l}$ .

4. Généraliser l'expression de l'énergie potentielle  $E_{p,el}(x, y, z)$  lorsque la particule peut se déplacer dans l'espace à trois dimensions.

Les raideurs peuvent être différentes dans les 3 directions de l'espace et la forme la plus générale est

$$E_{p,el}(x, y, z) = k_1 x^2/2 + k_2 y^2/2 + k_3 z^2/2$$

On en déduit que la forme la plus générale du puits d'énergie potentielle dans lequel cette particule évolue est donné par l'expression :

$$\Phi(x, y, z) = \alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2. \quad (7)$$

Pour guider ou piéger des particules chargées de charge  $Q$ , on souhaite générer pour ces particules un tel puits d'énergie potentielle. Pour cela, on applique des potentiels électriques à des électrodes pour engendrer un potentiel électrostatique de la forme  $V(x, y, z)$  dans l'espace inter-électrodes.

5. Donner la relation qui lie l'énergie potentielle  $\Phi(x, y, z)$  et le potentiel électrostatique  $V(x, y, z)$ .

$$\Phi(x, y, z) = Q \times V(x, y, z)$$

6. Montrer que le potentiel électrostatique  $V(x, y, z)$  doit vérifier l'équation de Laplace dans l'espace vide inter-électrodes. En déduire la relation qui lie  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ .  
 L'espace inter-électrode est vide de charge donc  $\text{div}(\mathbf{E}) = 0$ . Comme  $\mathbf{E} = -\text{grad}V$  alors  $\text{div}(\text{grad}V) = \Delta V = 0$ .  
 $\Delta V = 2 \times (\alpha + \beta + \gamma)$  donc il faut que  $(\alpha + \beta + \gamma) = 0$  pour que le potentiel obéisse à l'équation de Laplace.
7. Dans le cas où on ne souhaite contrôler le mouvement des particules chargées que dans le plan  $(x, y)$ , montrer que le potentiel électrostatique est de la forme  $V(x, y) = A(x^2 - y^2)$ . Tracer le profil spatial de l'énergie potentielle  $\Phi(x, y)$  selon les axes  $(Ox)$  et  $(Oy)$  pour un produit  $QA > 0$  et commenter sa capacité à guider une particule chargée.  
 Pas de rappel dans la direction  $Oz$  donc  $\gamma = 0$  et donc  $\alpha = -\beta$  et  $V(x, y) = A(x^2 - y^2)$ .  
 Pour  $QA > 0$ , l'énergie potentielle  $\Phi(x, y) = QA(x^2 - y^2)$  est croissante pour  $|x|$  croissant. Elle donne lieu à une force de rappel en  $x = 0$ .  $\Phi(x, y)$  est décroissante  $|y|$  et donne lieu à une force qui "expulse" le système du point  $y = 0$  car l'accélération est d'autant plus grande que la distance au point  $y = 0$  est grande. La trajectoire est divergente le long de la direction  $Oy$ .
8. Dans le cas d'un contrôle du mouvement dans les trois dimensions de l'espace et d'un potentiel électrostatique à symétrie cylindrique d'axe  $(Oz)$ , montrer que celui-ci est de la forme  $V(x, y, z) = A(x^2 + y^2 - 2z^2)$ . Tracer le profil spatial de l'énergie potentielle  $\Phi(x, y, z)$  selon les axes  $(Ox)$  et  $(Oz)$  pour un produit  $QA > 0$  et commenter sa capacité à piéger une particule chargée.  
 Symétrie cylindrique d'axe  $Oz$  si  $\alpha = \beta$  et donc  $\gamma = -2\alpha$  d'où la forme générale  $V(x, y, z) = A(x^2 + y^2 - 2z^2)$ . Commentaire idem...

## Équation du mouvement d'une particule unique dans un quadrupole à deux dimensions

On s'intéresse ici à la situation où le mouvement de la particule chargée est contrôlée selon deux dimensions, dans le plan  $(x, y)$ . Dans la pratique, on génère le potentiel décrit plus haut en plaçant 4 barreaux conducteurs identiques au 4 coins d'un carré et en les polarisant par  $+V/2$  et  $-V/2$  alternativement, c'est un quadrupole (voir la figure 2 pour un schéma de principe). On note  $r_0$  la plus courte distance entre le centre du carré et la surface de chacun des barreaux et  $R$  le rayon de chaque barreau. Par convention, on choisit d'appliquer  $+V/2$  aux barreaux dont les centres sont sur l'axe  $Ox$ , avec  $V > 0$ . Les barreaux sont numérotés de 1 à 4 et le barreau numéroté  $i$  engendre en un point  $P$  de l'espace inter-électrodes un champ électrique noté  $\mathbf{E}_i(P)$  et un potentiel électrique noté  $V_i(P)$ .

9. Considérons tout d'abord un seul barreau, de longueur  $L$  suffisante pour qu'on puisse considérer le problème comme invariant par translation le long de sa longueur. Il est polarisé par le potentiel  $+V/2$ . Donner la direction du champ électrique créé par le barreau dans l'espace qui l'entoure. Justifier que la norme ne dépende que de  $r_1$ , la distance entre le centre du barreau et le point considéré.

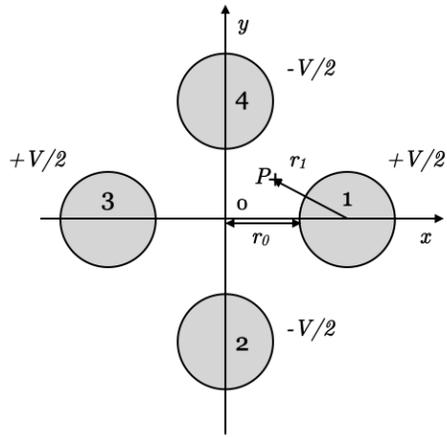


FIGURE 2 – Section dans le plan  $(x, y)$  d'un quadrupole de rayon interne  $r_0$ . Les barreaux, de rayon  $R$ , sont numérotés de 1 à 4 et polarisés alternativement  $+V/2$  et  $-V/2$ .

Tous les plans passant par l'axe central du barreau sont des plans de symétrie du système. Pour des barreaux infinis, tous les plans  $z = cste$  sont aussi des plans de symétrie. Comme le champ électrique doit être inclus dans les plans de symétrie, il est de direction radiale, dans le plan  $z = cste$ . Le système étant invariant par translation le long de  $Oz$  et à symétrie de rotation, le seul paramètre dont peut dépendre le champ électrique est  $r_1$ .

10. Démontrer que le barreau est chargé en surface, avec une densité surfacique de charge  $\sigma$  que l'on peut exprimer en fonction de  $E_1(R)$ .

Le barreau est conducteur, la densité de charge volumique est donc nulle et les charges s'accumulent en surface. La relation de continuité du champ électrique normal à la surface impose que

$$\vec{E}_1(R) = \sigma / \epsilon_0 \vec{n}$$

avec  $\vec{n}$  le vecteur normal à la surface au point considéré. Donc la densité surfacique de charge est  $\sigma = \epsilon_0 E_1(R)$

11. Obtenir l'expression de  $E_1(r_1)$  en fonction de  $\sigma$ ,  $R$ ,  $r_1$  et  $\epsilon_0$ .

Le théorème de Gauss à travers un cylindre de longueur  $l$  et de rayon  $r_1$  donne le flux  $\Psi_E$  de  $\mathbf{E}$  en fonction de la charge intérieure à la surface  $Q_{int}$ . Le champ est radial donc pas de flux à travers les 2 extrémités du cylindre et

$$\Psi_E = E_1(r_1) 2\pi r_1 l = Q_{int} / \epsilon_0 = \sigma 2\pi r_1 l / \epsilon_0$$

donc

$$E_1(r_1) = \frac{\sigma R}{\epsilon_0 r_1}$$

12. En déduire l'expression du potentiel électrostatique créé en  $r_1 \geq R$ ,  $V_1(r_1)$ .

Problème à symétrie cylindrique :  $\mathbf{E}_1(r_1) = -\mathbf{grad}(V(r_1)) = -\frac{dV}{dr_1}\mathbf{u}_r$  donc  $\frac{dV}{dr_1} = -\frac{\sigma R}{\epsilon_0 r_1}$ .

$$V_1(r_1) = -\frac{\sigma R}{\epsilon_0} \ln(r_1) + K$$

On définit la constante  $K$  par continuité du potentiel en  $r_1 = R$ , qui impose

$$V_1(R) = -\frac{\sigma R}{\epsilon_0} \ln(R) + K = V/2 \quad \text{et} \quad \text{donc} \quad V_1(r_1) = \frac{\sigma R}{\epsilon_0} \ln(R/r_1)$$

13. Quand les 4 barreaux sont polarisés en configuration quadrupole, les densités surfaciques de charge des barreaux 2, 3 et 4 sont respectivement  $-\sigma$ ,  $+\sigma$  et  $-\sigma$ . En invoquant le théorème de superposition, donner l'expression du potentiel créé par ces 4 barreaux en un point  $P$  de l'espace interne au 4 barreaux, repéré par  $(x, y)$ . Pour cela, on nomme  $r_i$ , la distance du point  $P$  au centre du barreau  $i$  (voir Fig. 2).

Le théorème de superposition dit que  $V(P) = V_1(P) + V_2(P) + V_3(P) + V_4(P)$  soit

$$V(P) = \frac{\sigma R}{\epsilon_0} \ln(R/r_1) - \frac{\sigma R}{\epsilon_0} \ln(R/r_2) + \frac{\sigma R}{\epsilon_0} \ln(R/r_3) - \frac{\sigma R}{\epsilon_0} \ln(R/r_4) \quad (8)$$

$$= \frac{\sigma R}{\epsilon_0} \ln\left(\frac{r_2 r_4}{r_1 r_3}\right) \quad (9)$$

14. Pour un point  $P$  en  $(x, y = 0)$ , exprimer les distances  $r_i$  en fonction de  $x$ ,  $r_0$  et  $R$ . Pour un point proche du centre du quadrupole tel que  $|x| \ll (r_0 + R)$ , montrer que le potentiel créé par les 4 barreaux peut s'écrire comme :

$$V(x, y = 0) = \frac{\sigma R}{\epsilon_0} \frac{2x^2}{(r_0 + R)^2} \quad (10)$$

$r_1 = r_0 + R - x$ ,  $r_3 = r_0 + R + x$ ,  $r_2 = r_4 = \sqrt{(r_0 + R)^2 + x^2}$ . Alors

$$\frac{r_2 r_4}{r_1 r_3} = \frac{(r_0 + R)^2 + x^2}{(r_0 + R - x)(r_0 + R + x)} = \frac{(r_0 + R)^2 + x^2}{(r_0 + R)^2 - x^2}$$

Pour  $|x| \ll (r_0 + R)$ , au 2eme ordre en  $|x|/(r_0 + R)$  :

$$\frac{(r_0 + R)^2 + x^2}{(r_0 + R)^2 - x^2} = \frac{1 + x^2/(r_0 + R)^2}{1 - x^2/(r_0 + R)^2} \simeq \left(1 + \frac{x^2}{(r_0 + R)^2}\right) \left(1 + \frac{x^2}{(r_0 + R)^2}\right) \simeq (1 + 2x^2/(r_0 + R)^2)$$

Comme  $\ln(1 + \epsilon) \simeq 1 + \epsilon - \epsilon^2/2$ ,

$$\ln\left(\frac{r_2 r_4}{r_1 r_3}\right) \simeq \frac{2x^2}{(r_0 + R)^2}$$

et  $V(x, y = 0) = \frac{\sigma R}{\epsilon_0} \frac{2x^2}{(r_0 + R)^2}$ .

15. En utilisant l'expression générale démontrée dans la question (7) et les conditions aux bords imposées par les barreaux, expliciter la forme du potentiel électrostatique  $V(x, y)$  régnant entre les barreaux en fonction de  $V$ ,  $r_0$ ,  $x$  et  $y$ . En déduire l'expression du champ électrique statique noté  $\mathbf{E}_0(x, y)$  entre les barreaux.

On reprend l'expression générale  $V(x, y) = A(x^2 - y^2)$ . Les conditions aux bords sur le barreau 1 imposent que  $V(r_0, 0) = +V/2$ , ce qui impose  $Ar_0^2 = V/2$ . On a donc  $A = V/(2r_0^2)$  et

$$V(x, y) = V(x^2 - y^2)/(2r_0^2)$$

. Le champs électrique est  $\mathbf{E}_0(x, y) = -\mathbf{grad}V(x, y) = (-Vx/r_0^2, +Vy/r_0^2)$ .

16. On considère que la force de gravitation est négligeable devant les forces électriques. On qualifie de stable une trajectoire qui reste confinée dans un volume fini de l'espace. Décrire qualitativement la trajectoire d'une particule chargée de charge positive  $+Q$  introduite à une extrémité des barreaux en  $(x_0, y_0, -L/2)$  avec une vitesse initiale parallèle à l'axe  $Oz$  de la forme  $\vec{v}_0 = v_0\vec{u}_z$ .

La force  $\mathbf{F}$  subie par la charge positive  $+Q$  est  $\mathbf{F} = Q\mathbf{E}_0(x, y)$ . Cette force a bien la forme d'une forme de rappel selon la direction  $Ox$  mais d'une force expulsante selon la direction  $Oy$  qui donne lieu a une trajectoire instable. En fois rentrée dans le quadrupole, la trajectoire de la particule chargée va diverger dans la direction  $Oy$  et la particule ne sera pas guidée le long de l'axe du quadrupole.

Pour guider cette particule jusqu'à la sortie du quadrupole en  $z = +L/2$ , la solution est de retourner périodiquement le champ électrique pour focaliser et défocaliser sa trajectoire alternativement le long des directions  $Ox$  et  $Oy$ . Les potentiels appliqués à chaque barreau sont tels que

$$V/2 = (U_{DC} - V_{RF} \cos(\Omega t))/2 \quad (11)$$

où  $U_{DC}$  reste une composante statique à laquelle est maintenant ajoutée une composante oscillante à la fréquence  $\Omega/2\pi$ , d'amplitude  $V_{RF}$ .

17. Écrire les équations du mouvement d'une particule chargée de charge  $+Q$  et de masse  $m$  à l'intérieur d'un tel quadrupole (la force de Lorentz induite par le champ magnétique induit est négligeable).

Le principe fondamental de la dynamique donne  $m\mathbf{a} = Q\mathbf{E}_0$ . On a alors

$$m\ddot{x} = -Qx/r_0^2(U_{DC} - V_{RF} \cos(\Omega t)) \quad (12)$$

$$m\ddot{y} = +Qy/r_0^2(U_{DC} - V_{RF} \cos(\Omega t)) \quad (13)$$

18. Montrer qu'en introduisant des grandeurs sans dimension  $a_x, a_y, q_x, q_y$  on peut mettre les équations du mouvement sous la forme de deux équations de Mathieu :

$$\begin{cases} \frac{4}{\Omega^2} \frac{d^2x}{dt^2} + (a_x - 2q_x \cos(\Omega t))x = 0 \\ \frac{4}{\Omega^2} \frac{d^2y}{dt^2} + (a_y - 2q_y \cos(\Omega t))y = 0 \end{cases} \quad (14)$$

Montrer que les paramètres  $a_x, a_y, q_x$  et  $q_y$  s'écrivent

$$a_x = -a_y = \frac{K_a Q U_{DC}}{mr_0^2 \Omega^2}; \quad q_x = -q_y = \frac{K_q Q V_{RF}}{mr_0^2 \Omega^2}; \quad (15)$$

avec  $K_a$  et  $K_q$  des constantes à définir.

À partir des équations précédentes, on a

$$\begin{aligned}\ddot{x} &= -Q/(mr_0^2)(U_{DC} - V_{RF} \cos(\Omega t))x \\ \ddot{y} &= +Q/(mr_0^2)(U_{DC} - V_{RF} \cos(\Omega t))y\end{aligned}\quad (16)$$

Et en multipliant les 2 équations par  $4/\Omega^2$ , on obtient un jeu d'équations sans dimension

$$\begin{aligned}\frac{4}{\Omega^2}\ddot{x} + \frac{4Q}{\Omega^2 mr_0^2}(U_{DC} - V_{RF} \cos(\Omega t))x &= 0 \\ \frac{4}{\Omega^2}\ddot{y} - \frac{4Q}{\Omega^2 mr_0^2}(U_{DC} - V_{RF} \cos(\Omega t))y &= 0\end{aligned}\quad (17)$$

qui prennent la forme des équations de Mathieu avec les paramètres tels que définis si  $K_a = 4$  et  $K_q = 2$ .

Les solutions des équations de Mathieu sont de la forme

$$x(t) = Ae^{i\omega_x t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_{2n} e^{in\Omega t} + Be^{-i\omega_x t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_{2n} e^{-in\Omega t}\quad (18)$$

avec  $A$ ,  $B$  et  $C_0$  dépendant des conditions initiales et

$$\omega_{x,y} = \beta_{x,y}\Omega/2,\quad (19)$$

$\beta_x$  et  $\beta_y$  ne dépendant que des paramètres de Mathieu  $a_{x,y}$  et  $q_{x,y}$ .

19. Montrer qu'en combinant les Eq. (14) et (18), on obtient la relation de récurrence suivante entre  $C_{2n}$ ,  $C_{2n+2}$  et  $C_{2n-2}$ .

$$C_{2n} ((\beta_x + 2n)^2 - a_x) + q_x(C_{2n-2} + C_{2n+2}) = 0\quad (20)$$

On utilise la forme des solutions de l'équation de Mathieu pour écrire la dérivée seconde de  $x$  : L'Eq. (18) permet d'écrire

$$\begin{aligned}\ddot{x} &= A \sum_{n=-\infty}^{\infty} (in\Omega + i\omega_x)^2 C_{2n} e^{in\Omega t} e^{i\omega_x t} + B \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-in\Omega - i\omega_x)^2 C_{2n} e^{-in\Omega t} e^{-i\omega_x t} \\ \frac{4}{\Omega^2}\ddot{x} &= A \sum_{n=-\infty}^{\infty} -(2n + 2\omega_x/\Omega)^2 C_{2n} e^{in\Omega t} e^{i\omega_x t} + B \sum_{n=-\infty}^{\infty} -(2n + 2\omega_x/\Omega)^2 C_{2n} e^{-in\Omega t} e^{-i\omega_x t} \\ \frac{4}{\Omega^2}\ddot{x} &= A \sum_{n=-\infty}^{\infty} -(2n + \beta_x)^2 C_{2n} e^{in\Omega t} e^{i\omega_x t} + B \sum_{n=-\infty}^{\infty} -(2n + \beta_x)^2 C_{2n} e^{-in\Omega t} e^{-i\omega_x t}\end{aligned}\quad (21)$$

On injecte ensuite cette forme analytique dans l'équation différentielle Eq. (14).

$$\frac{4}{\Omega^2}\ddot{x} + (a_x - 2q_x \cos(\Omega t)) \left[ A \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_{2n} e^{in\Omega t} e^{i\omega_x t} + B \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_{2n} e^{-in\Omega t} e^{-i\omega_x t} \right] = 0\quad (22)$$

Comme  $\cos(\Omega t) = (e^{i\Omega t} + e^{-i\Omega t})/2$ , on peut écrire :

$$\frac{4}{\Omega^2}\ddot{x} + A \sum_{n=-\infty}^{\infty} (a_x - q_x(e^{i\Omega t} + e^{-i\Omega t}))C_{2n}e^{in\Omega t}e^{i\omega_x t} + B \sum_{n=-\infty}^{\infty} (a_x - q_x(e^{i\Omega t} + e^{-i\Omega t}))C_{2n}e^{-in\Omega t}e^{-i\omega_x t} \quad (23)$$

Les égalités précédentes doivent être vérifiées pour chaque terme oscillant à une fréquence donnée, on a donc pour chaque  $n$  (équations identiques pour les termes en  $\pm i\Omega t$ ) :

$$-(2n + \beta_x)^2 C_{2n} + a_x C_{2n} - q_x(C_{2(n+1)} + C_{2(n-1)}) = 0 \quad (24)$$

$$C_{2n}((2n + \beta_x)^2 - a_x) + q_x(C_{2(n+1)} + C_{2(n-1)}) = 0 \quad (25)$$

20. Dans le cadre de l'approximation ( $a_x, q_x^2 \ll 1$ ), on peut montrer que  $\beta_x$  est réel, que  $\beta_x^2 \simeq a_x + q_x^2/2$ , que  $C_{+2} = C_{-2} = C_2$  et que la série de Fourier de l'équation (18) peut être tronquée aux termes  $n = -1, 0, +1$  tout en fournissant une description pertinente du mouvement. Montrer alors que pour un ion avec une vitesse nulle à  $t = 0$ , la position le long de l'axe  $Ox$  est décrite par l'équation

$$x(t) = X \cos(\omega_x t) \left(1 - \frac{q_x}{2} \cos(\Omega t)\right) \quad (26)$$

En utilisant la relation de récurrence précédente pour  $n = 0$ , on a

$$C_0(\beta_x^2 - a_x) + q_x(C_2 + C_{-2}) = 0.$$

Comme  $C_{+2} = C_{-2} = C_2$ ,

$$C_0(\beta_x^2 - a_x) + 2q_x C_2 = 0,$$

et comme  $\beta_x^2 - a_x \simeq q_x^2/2$ ,

$$C_0 q_x / 4 + C_2 = 0$$

En reprenant l'Eq.(18) limitée à  $n = -1, 0, +1$  avec la relation précédente reliant, on peut écrire

$$x(t) = C_0 A e^{i\omega_x t} [1 - q_x/4 (e^{i\Omega t} + e^{-i\Omega t})] + C_0 B e^{-i\omega_x t} [1 - q_x/4 (e^{i\Omega t} + e^{-i\Omega t})]$$

qu'on peut mettre sous la forme

$$x(t) = C_0 \left(1 - \frac{q_x}{2} \cos(\Omega t)\right) (A e^{i\omega_x t} + B e^{-i\omega_x t})$$

La vitesse de la particule s'écrit alors comme

$$v(t) = C_0 \frac{q_x}{2} \sin(\Omega t) (A e^{i\omega_x t} + B e^{-i\omega_x t}) + C_0 \left(1 - \frac{q_x}{2} \cos(\Omega t)\right) (A i\omega_x e^{i\omega_x t} + B (-i\omega_x) e^{-i\omega_x t})$$

Pour avoir  $v(t = 0) = 0$  sans avoir une solution trivialement nulle, il faut que  $A = B$  et on a donc bien la forme recherchée avec

$$x(t) = 2C_0 A \cos(\omega_x t) \left(1 - \frac{q_x}{2} \cos(\Omega t)\right) \quad (27)$$

21. Dans un quadrupole tel que  $r_0 = 5$  mm, où le potentiel appliqué n'a pas de composante statique et où le potentiel oscille à une fréquence de 1 MHz, donner les valeurs que peut prendre  $V_{RF}$  pour que des ions  $^{40}\text{Ca}^+$  aient une trajectoire décrite par l'équation (26), soit  $|q_x| < 0,3$ .

Pour avoir  $q_x < 0,3$ , il faut que  $V_{RF} < 0,3(mr_0^2\Omega^2)/2Q$ .

$$\frac{mr_0^2\Omega^2}{2Q} = \frac{6,68 \times 10^{-26} \cdot (0,5 \times 10^{-3})^2 \cdot (2\pi)^2 (10^6)^2}{2,1,60 \times 10^{-19}} = 206V$$

Il faut donc que  $V_{RF}$  soit inférieure à 61,8 V pour que la description précédente soit pertinente.

22. En utilisant la relation qui lie  $\omega_x$  à  $\Omega$  (voir Eq. (19)), tracer  $x(t)$  pour  $a_x = 0$  et  $q_x = 0,2 \times \sqrt{2} = 0,283$ . Montrer qu'il existe 2 temps caractéristiques différents au sein du mouvement et décrire l'amplitude relative de chaque contribution.

Avec  $q_x = 0,2 \times \sqrt{2} = 0,283$ , Le rapport entre  $\omega_x/\Omega = \beta_x/2 = q_x/\sqrt{2}/2 = 0,1$ . Les

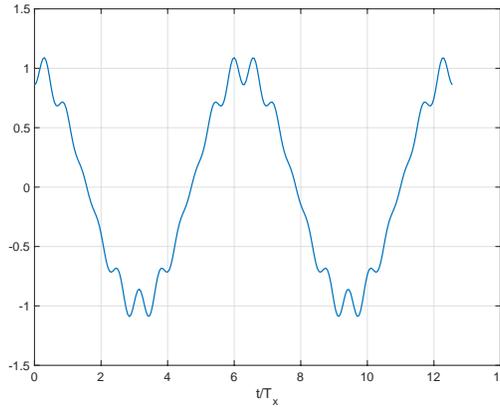


FIGURE 3 – trajectoire  $x(t) = \cos(\omega_x t) \left(1 - \frac{q_x}{2} \cos(\Omega t)\right)$  en fonction de  $t/T_x$  avec  $T_x = 2\pi/\omega_x$

deux périodes du mouvement sont dans un rapport 10 : le mouvement le plus lent est un mouvement de type oscillateur harmonique et le mouvement le plus rapide a une amplitude d'autant plus grande que l'écart au centre est grand, le rapport entre les 2 élongations est fixe. On peut comprendre le mouvement rapide comme une perturbation du mouvement harmonique.

Un tel mouvement peut être compris en faisant des approximations sur ces temps caractéristiques du mouvement. Supposons tout d'abord qu'il n'y a pas de potentiel statique ( $U_{DC} = 0$ ). Si le champ électrique oscillant  $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) \cos(\Omega t)$  est uniforme ( $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0$ ), le mouvement de la particule se réduit à un simple mouvement forcé  $\mathbf{R}_1(t) = (-\mathbf{s} \cos(\Omega t))$  d'amplitude  $\mathbf{s}$ .

23. Écrire l'équation vérifiée par le vecteur position  $\mathbf{R}_1(t) = -\mathbf{s} \cos(\Omega t)$  et en déduire l'expression de  $\mathbf{s}$  en fonction de  $\mathbf{E}_0$ ,  $Q$ ,  $m$  et  $\Omega$ .

L'équation de la dynamique donne  $m\ddot{\mathbf{R}}_1(t) = Q\mathbf{E}_0 \cos(\Omega t)$ , on cherche donc une solution oscillante de la forme  $\mathbf{R}_1(t) = -\mathbf{s} \cos(\Omega t)$ . Pour que cette expression soit solution, il faut que  $\ddot{\mathbf{R}}_1(t) = \Omega^2 \mathbf{s} \cos(\Omega t) = (Q/m)\mathbf{E}_0 \cos(\Omega t)$ . On a alors

$$\mathbf{s} = \frac{Q}{m\Omega^2} \mathbf{E}_0$$

Si  $\mathbf{E}_0(\mathbf{r})$  n'est pas uniforme, la position  $\mathbf{r}(t)$  de l'ion décrit un mouvement qui peut être décomposé en  $\mathbf{r}(t) = \mathbf{R}_0(t) + \mathbf{R}_1(t)$  avec  $\mathbf{R}_0(t)$  un mouvement lent induit par la variation de l'amplitude du champ oscillant, appelé *macro-mouvement* et  $\mathbf{R}_1(t)$  le mouvement forcé par l'oscillation temporelle du champ, appelé *micro-mouvement*. Son amplitude est équivalente à  $\mathbf{s}(\mathbf{r}(t))$  qui dépend du champ oscillant local, et donc de la position de l'ion à l'instant  $t$ , de telle sorte que  $\mathbf{R}_1(t) = -\mathbf{s}(\mathbf{r}(t)) \cos(\Omega t)$ . Une solution simple à ce problème peut être obtenue en faisant deux approximations :

1. **l'approximation adiabatique** qui suppose que le temps typique d'évolution de  $\mathbf{s}(\mathbf{r}(t))$  est bien plus long qu'une période d'oscillation du champ électrique.
  2. l'approximation d'un petit micro-mouvement qui autorise le développement au premier ordre de  $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}(t))$  autour de  $\mathbf{R}_0(t)$ .
24. Traduire la première approximation en terme d'inégalité, impliquant  $(\mathbf{s}, \dot{\mathbf{s}}, \Omega)$ .

La période d'oscillation du champ électrique est  $2\pi/\Omega$  alors que le temps typique d'évolution de la dynamique est  $\|\mathbf{s}\|/\|\dot{\mathbf{s}}\|$ . L'approximation précédente impose donc que  $\Omega\|\mathbf{s}\| \gg \|\dot{\mathbf{s}}\|$ .

25. En déduire que

$$\ddot{\mathbf{r}}(t) = \ddot{\mathbf{R}}_0(t) + \mathbf{s}(t)\Omega^2 \cos(\Omega t) \quad (28)$$

En utilisant l'approximation  $\Omega\mathbf{s}(t) \gg \dot{\mathbf{s}}(t)$ , on a

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{R}_0(t) - \mathbf{s}(t) \cos(\Omega t) \quad (29)$$

$$\dot{\mathbf{r}}(t) = \dot{\mathbf{R}}_0(t) - \dot{\mathbf{s}}(t) \cos(\Omega t) + \Omega\mathbf{s}(t) \sin(\Omega t) \quad (30)$$

$$\dot{\mathbf{r}}(t) \simeq \dot{\mathbf{R}}_0(t) + \Omega\mathbf{s}(t) \sin(\Omega t) \quad (31)$$

$$\ddot{\mathbf{r}}(t) = \ddot{\mathbf{R}}_0(t) + \Omega\dot{\mathbf{s}}(t) \sin(\Omega t) + \Omega^2\mathbf{s}(t) \cos(\Omega t) \quad (32)$$

$$\ddot{\mathbf{r}}(t) \simeq \ddot{\mathbf{R}}_0(t) + \Omega^2\mathbf{s}(t) \cos(\Omega t) \quad (33)$$

$$(34)$$

26. En assimilant  $\mathbf{s}(\mathbf{r}(t))$  à  $\mathbf{s}(\mathbf{R}_0(t))$ , on peut montrer que

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}(t)) = \mathbf{E}_0(\mathbf{R}_0(t)) - \frac{Q \cos(\Omega t)}{2m\Omega^2} \mathbf{grad}(E_0^2(\mathbf{R}_0(t))) \quad (35)$$

En déduire que

$$m\ddot{\mathbf{R}}_0 = -\frac{Q^2}{2m\Omega^2} \mathbf{grad}(E_0^2(\mathbf{R}_0(t))) \cos^2(\Omega t) \quad (36)$$

La relation fondamentale de la dynamique pour la particule chargée de masse  $m$  est

$$m\ddot{\mathbf{r}}(t) = Q\mathbf{E}_0(\mathbf{r}(t)) \quad (37)$$

$$m\ddot{\mathbf{R}}_0(t) + m\Omega^2\mathbf{s}(t) \cos(\Omega t) = Q\mathbf{E}_0(\mathbf{R}_0(t)) \cos(\Omega t) - \frac{Q^2 \cos^2(\Omega t)}{2m\Omega^2} \mathbf{grad}(E_0^2(\mathbf{R}_0(t))) \quad (38)$$

Comme  $\mathbf{s}(t) = \frac{Q}{m\Omega^2} \mathbf{E}_0(\mathbf{R}_0(t))$ , deux termes sont égaux et il reste

$$m\ddot{\mathbf{R}}_0 = -\frac{Q^2}{2m\Omega^2} \mathbf{grad}(E_0^2(\mathbf{R}_0(t))) \cos^2(\Omega t) \quad (39)$$

27. En considérant que  $\mathbf{R}_0(t)$  ne suit que l'évolution de l'enveloppe du champ électrique et pas ses oscillations temporelles rapides, montrer que

$$m\ddot{\mathbf{R}}_0 = -\frac{Q^2}{4m\Omega^2} \mathbf{grad}(E_0^2(\mathbf{R}_0(t))). \quad (40)$$

On note  $\langle \rangle$  la moyenne sur une période RF d'oscillation du champ électrique, l'approximation dit que

$$m \langle \ddot{\mathbf{R}}_0 \rangle \simeq m\ddot{\mathbf{R}}_0 = -\frac{Q^2}{2m\Omega^2} \langle \mathbf{grad}(E_0^2(\mathbf{R}_0(t))) \cos^2(\Omega t) \rangle \simeq -\frac{Q^2}{2m\Omega^2} \mathbf{grad}(E_0^2(\mathbf{R}_0(t))) \times 1/2 \quad (41)$$

En conclure que, en ce qui concerne le macro-mouvement  $\mathbf{R}_0(t)$ , tout se passe comme si la particule était dans un puits d'énergie potentielle statique  $\Psi^*(\mathbf{r})$  appelé **pseudo-énergie potentielle** dont l'expression générale est

$$\Psi^*(\mathbf{r}) = \frac{Q^2 E_0^2(\mathbf{r})}{4m\Omega^2}. \quad (42)$$

L'équation différentielle précédente, qui décrit l'évolution temporelle de  $\mathbf{R}_0$  est celle d'une masse  $m$ , dont la position est  $\langle \mathbf{R}_0 \rangle$  et qui est soumis à une force  $-\mathbf{grad}(Q^2 E_0(\mathbf{R}_0)^2 / (4m\Omega^2))$ , qui dérive de l'énergie potentielle  $\Psi^*(\mathbf{r})$ .

28. Donner la forme analytique de cette pseudo-énergie potentielle dans le cas particulier du quadrupole à deux dimensions fait de quatre barreaux (voir question 15) en fonction de  $Q$ ,  $V_{RF}$ ,  $r_0$ ,  $x$  et  $y$ . Qu'en conclure sur la trajectoire d'une particule chargée injectée à l'entrée du quadrupole ?

On sait que  $E_0^2(x, y) = V_{RF}^2(x^2 + y^2)/r_0^2$ . On a alors

$$\Psi^*(\mathbf{r}) = \frac{Q^2 V_{RF}^2(x^2 + y^2)}{4m\Omega^2 r_0^2}. \quad (43)$$

Cette nouvelle forme de potentiel moyen forme un puits de potentiel, et induit une force de rappel, dans les deux directions de l'espace. La particule chargée est maintenant ramenée sur l'axe du quadrupole lors de sa propagation dans la direction  $Oz$  et peut poursuivre sa propagation le long des barreaux sans être éjectée.

29. Dans le cas où un potentiel statique  $U_{DC}$  est aussi appliqué, le principe de superposition permet d'exprimer la pseudo-énergie potentielle statique totale qui contrôle le macro-mouvement de la particule chargée. En utilisant la forme générale du potentiel statique démontré dans la question 15), donner cette expression analytique dans le cas d'un quadropole à deux dimensions.

La pseudo-énergie potentielle correspond à un potentiel statique  $\Psi^*(\mathbf{r})/Q$ . Le principe de superposition indique que le potentiel électrique local est la somme des potentiels de sources différentes, ici statique et oscillante :  $\Psi^*(\mathbf{r})/Q + U_{DC}(x^2 - y^2)/2r_0^2$ . L'énergie potentielle totale est alors

$$\Psi^*(\mathbf{r})_{DC-RF} = \frac{Q^2 V_{RF}^2 (x^2 + y^2)}{4m\Omega^2 r_0^2} + \frac{U_{DC}(x^2 - y^2)}{2r_0^2} \quad (44)$$

## Fonctionnement d'un spectromètre de masse

Les quadropoles radio-fréquences tels que nous venons de les décrire peuvent fonctionner comme des filtres de masse. Couplés à une source d'ionisation et à un détecteur, ils deviennent des spectromètres de masse, très utilisés en analyse chimique. L'effet de filtrage en masse tire partie de la divergence des trajectoires des particules pour certaines valeurs de  $(a_x, q_x)$  et  $(a_y, q_y)$ . En effet, pour que les trajectoires restent dans un domaine borné de l'espace, et que les particules ne soient pas expulsées latéralement du quadropole avant de l'avoir traversé, il faut que les valeurs de  $\beta_x$  et  $\beta_y$  soient réelles. On dit alors que les trajectoires sont stables. La valeur maximale que  $|a_x| = |a_y|$  peuvent prendre pour assurer la stabilité de la trajectoire vaut  $a_m = 0,237$  et il faut alors que  $|q_x| = |q_y| = q_m = 0,707$  pour que la trajectoire soit stable.

Dans sa leçon du prix Nobel, Wolfgang Paul montre le premier spectre de masse qui a permis de résoudre les deux isotopes du rubidium  $^{85}\text{Rb}$  (masse  $m_1$ ) et  $^{87}\text{Rb}$  (masse  $m_2$ ). Dans ces expériences, les atomes sont d'abord ionisés une fois par bombardement électronique avant d'entrer dans le quadropole et la stratégie utilisée était de faire varier sur une faible plage la fréquence  $\Omega/2\pi$  du piège autour de la valeur 2.44 MHz et pour des valeurs de  $U_{DC}$  et  $V_{RF}$  fixées et donc un rapport  $u = U_{DC}/V_{RF}$  fixe (voir Fig. 4).

30. Pour la valeur maximale de  $u$  utilisée dans l'expérience, on peut supposer que seules les particules ayant des trajectoires décrites par le paramètre de Mathieu  $q_x = q_m$  et  $a_x = a_m$  seront détectées en sortie du filtre. En déduire une relation simple entre les masses  $m_1$  et  $m_2$  et les valeurs de fonctionnement du piège  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$  pour lesquelles ces masses sont détectées en sortie du filtre.

Revenons aux équations

$$a_x = \frac{4QU_{DC}}{mr_0^2\Omega^2}; \quad q_x = \frac{2QV_{RF}}{mr_0^2\Omega^2}; \quad (45)$$

Pour  $U_{DC}$  et  $V_{RF}$  fixes, avec  $\Omega$  variable, pour une masse donnée, le paramètre de Mathieu atteint sa valeurs maximale assurant la stabilité des trajectoires pour

$$m\Omega^2 = \frac{2QV_{RF}}{r_0^2 q_m}$$

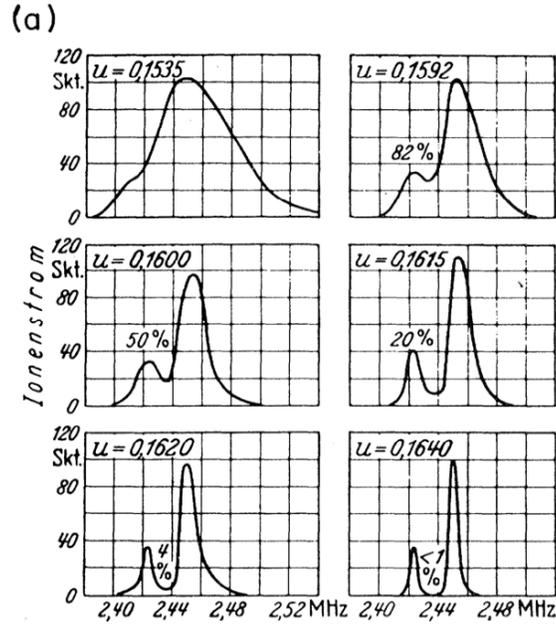


FIGURE 4 – Premiers spectres de masse du rubidium, où l’axe des abscisses donne la fréquence  $\Omega/2\pi$  qui est balayée pour plusieurs valeurs de  $u = U_{DC}/V_{RF}$ , L’axe des ordonnées donne le signal du détecteur, proportionnel au nombre de particules chargées qui l’atteignent. Issue de W. Paul, Reviews of Modern Physics, Vol. 62, No. 3 (1990), page 531.

Pour que deux masses différentes aient des trajectoires stables avec cette valeur de  $q_x = q_m$ , il faut que

$$m_1 \Omega_1^2 = m_2 \Omega_2^2$$

31. En supposant les masses de ces deux isotopes connues, en déduire l’écart relatif attendu entre les deux fréquences de piégeage défini par  $(\Omega_2 - \Omega_1)/\Omega_1$  en fonction de  $m_1$  et  $m_2$ . Calculer la valeur attendue de cet écart relatif en prenant les masses des deux isotopes du rubidium  $m_1 = 85$  uma et  $m_2 = 87$  uma, comparer ce résultat aux données expérimentales.

Prenons la dérivée logarithmique de l’équation précédente :

$$\frac{\delta m}{m} + 2 \frac{\delta \Omega}{\Omega} = 0$$

Alors

$$\frac{\delta \Omega}{\Omega} = \frac{\Omega_2 - \Omega_1}{\Omega_1} = -\frac{\delta m}{2m} = \frac{m_1 - m_2}{2m_1}$$

On attend donc pour les 2 isotopes du Rubidium  $\delta\Omega/\Omega = 1/85$ . On voit sur la figure que  $\Omega/2\pi \simeq 2,44$  MHz et donc  $(\Omega_2 - \Omega_1)/2\pi = 2,44/85$  MHz=28 kHz. Cette valeur est compatible avec les résultats expérimentaux car les 2 pics sont séparés d’un carreau et demi et que 1 carreau représente 20 kHz.

32. Déduire des spectres l'abondance relative des deux isotopes en précisant l'isotope majoritaire.

La hauteur relative des pics renseignent sur l'abondance relative des 2 masses, soit  $2/5$ . Sachant que la masse la plus faible  $m_1$  correspond à une fréquence de fonctionnement la plus élevée, on sait grâce au spectre que c'est l'isotope 85 qui est le plus abondant.

### Électronique : filtrage passe-bande.

Les amplitudes des potentiels radio-fréquences appliqués aux barreaux atteignent couramment des centaines de volts. Pour les atteindre, une phase d'amplification est nécessaire mais il est primordial d'éliminer toutes les fréquences harmoniques de la fréquence de fonctionnement  $\Omega/2\pi$  avant amplification.

33. Proposer un circuit passif  $(R, L, C)$  qui peut être utilisé comme filtre passe-bande et donner sa fonction de transfert.

Schéma RLC série avec la sortie aux bornes de  $R$  : En régime oscillant permanent, la fonction de transfert caractérise la réponse en fréquence du circuit :  $H(\omega) = s(\omega)/e(\omega)$ . Pour ce circuit

$$H(\omega) = \frac{R}{R + jL\omega + 1/jC\omega} = \frac{R}{R + j(L\omega - 1/C\omega)}$$

34. Comment choisir les composants  $(R, L, C)$  pour que l'amplitude du signal oscillant à la fréquence  $\Omega/2\pi$  ne soit pas atténuée.

Il faut que le module de la fonction de transfert  $|H(\omega)| = 1$ , ce qui est la valeur maximale. Pour cela, il faut choisir les composants de telle sorte que  $\Omega^2 = 1/LC$ .

35. Comment choisir les composants  $(R, L, C)$  pour que l'amplitude du signal oscillant à la fréquence  $2 \times \Omega/2\pi$  soit atténuée d'un facteur supérieur à 10.

Il faut que  $|H(2\Omega)| < 1/10$ . On peut écrire

$$H(\omega) = \frac{R}{R + jL\omega(1 - 1/LC\omega^2)} = \frac{R}{R + jL\omega(1 - \Omega^2/\omega^2)}$$

On a alors

$$H(2\Omega) = \frac{R}{R + jL2\Omega(1 - 1/4)} = \frac{R}{R + jL\omega 3/2} \quad \text{et} \quad |H(2\Omega)| = \frac{1}{\sqrt{1 + 9L^2\Omega^2/(4R^2)}}$$

pour que  $|H(2\Omega)| < 1/10$ , il suffit que  $3L\Omega/(2R) > 10$  soit  $L/R > 20/(3\Omega)$ .

## Partie II : Comportement collectif d'un ensemble de particules chargées

On s'intéresse maintenant à des situations de confinement de particules identiques chargées en 3 dimensions, dans un piège à symétrie cylindrique d'axe  $Oz$ , dit piège de Paul. Le potentiel oscillant créé à l'intérieur du piège s'écrit alors

$$V(x, y, z, t) = (U_{DC} - V_{RF} \cos(\Omega t)) \frac{x^2 + y^2 - 2z^2}{2r_0^2} \quad (46)$$

Le concept de pseudo-énergie potentielle (voir Eq. (42)) s'applique toujours et permet d'expliquer le confinement dans les 3 directions de l'espace. Quand plusieurs particules sont piégées simultanément, leur dynamique n'est plus représentée fidèlement par des équations de Mathieu à cause de la répulsion coulombienne qui s'exerce entre elles. Quand le nombre de particules piégées atteint plusieurs centaines, les grandeurs collectives sont pertinentes pour décrire les propriétés d'équilibre et le théorème du viriel permet alors d'obtenir des informations globales sur tout le nuage. Le théorème du viriel, qui suppose un système à l'état stationnaire dont le barycentre est immobile, permet de relier les moyennes dans le temps (représentées par une barre) de l'énergie cinétique du système à celle de son viriel  $\mathcal{V}$  par

$$\overline{E_C} = -\frac{1}{2}\overline{\mathcal{V}} \quad (47)$$

où le viriel est la somme sur les particules  $i$  du produit scalaire de la force  $\mathbf{f}_i$  qui s'exerce sur cette particule et de sa position  $\mathbf{r}_i$  par rapport à un référentiel fixe

$$\mathcal{V} = \sum_i \mathbf{f}_i \cdot \mathbf{r}_i \quad (48)$$

36. Dans le cadre de l'approximation de la pseudo-énergie potentielle, il est légitime d'utiliser une notation simplifiée de la forme  $\Psi^*(x, y, z) = \alpha_x x^2 + \alpha_y y^2 + \alpha_z z^2$ . Donner l'expression de la force notée  $\mathbf{f}_i^*$  associée à cette pseudo-énergie potentielle qui s'exerce sur la particule numérotée  $i$  dont les coordonnées sont  $(x_i, y_i, z_i)$ . En déduire la relation qui lie le viriel  $\mathcal{V}^*$  associé à la pseudo-énergie potentielle de confinement et l'énergie potentielle de confinement du nuage  $E_P^*$  (somme des énergies potentielles associées aux forces  $\mathbf{f}_i^*$ ). La force  $\mathbf{f}_i^*$  est égale à  $-\mathbf{grad}\Psi^*(x_i, y_i, z_i) = (-2\alpha_x x_i, -2\alpha_y y_i, -2\alpha_z z_i)$ . Le produit scalaire pour la particule  $i$   $\mathbf{f}_i^* \cdot \mathbf{r}_i = -2(\alpha_x x_i^2 + \alpha_y y_i^2 + \alpha_z z_i^2) = -2\Psi^*(x, y, z)$ . La somme sur les particules donne  $\mathcal{V}^* = -2E_P^*$ .

37. Pour calculer le viriel des forces de répulsion coulombienne  $\mathcal{V}_{Coul}$ , on considère tout d'abord un système de 2 particules chargées identiques, nommées 1 et 2. On note  $\mathbf{r}_{12}$  le vecteur  $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ , et  $r_{12} = \|\mathbf{r}_{12}\|$  la distance entre ces 2 particules. Donner l'expression de l'énergie potentielle d'interaction coulombienne. Exprimer ensuite la force  $\mathbf{f}_1$  de répulsion coulombienne exercée par la particule 2 sur la particule 1, et la force  $\mathbf{f}_2$  de répulsion coulombienne exercée par la particule 1 sur la particule 2. En déduire que le viriel est égal à l'énergie potentielle de répulsion coulombienne.

l'énergie potentielle d'interaction coulombienne est

$$E_P^{Coul} = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$$

La force  $\mathbf{f}_1$  de répulsion coulombienne exercée par la particule 2 sur la particule 1 est

$$\mathbf{f}_1 = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{r_{12}^3}$$

$$\mathbf{f}_2 = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{r_{12}^3} = -\mathbf{f}_1$$

Le viriel  $\mathcal{V}_{Coul} = \mathbf{f}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{f}_2 \cdot \mathbf{r}_2 = \mathbf{f}_1 \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  qu'on peut réécrire

$$\mathcal{V}_{Coul} = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{r_{12}^3} = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{r_{12}^2}{r_{12}^3} = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} = E_P^{Coul} \quad (49)$$

38. Dans un ensemble de  $N$  particules en interaction coulombienne,  $\mathbf{f}_1$  devient la force exercée sur la particule 1 par toutes les autres particules. Étendre la démonstration précédente à un ensemble de  $N$  particules en interaction coulombienne et montrer que

$$\mathcal{V}_{Coul} = \overline{E_P^{Coul}} \quad (50)$$

La force qui est exercée sur la particule  $i$  par toutes les autres est  $r_{ij} = \|\mathbf{r}_{ij}\|$  et  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$

$$\mathbf{f}_i = \sum_{j \neq i} \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{r_{ij}^3} \quad (51)$$

$$\mathbf{f}_i \cdot \mathbf{r}_i = \sum_{j \neq i} \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{r}_i}{r_{ij}^3} \quad (52)$$

$$\sum_i \mathbf{f}_i \cdot \mathbf{r}_i = \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{r}_i}{r_{ij}^3} \quad (53)$$

$$(54)$$

On peut réécrire la même somme en échangeant le rôle des indices :

$$\mathcal{V}_{Coul} = \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{r}_i}{r_{ij}^3} \quad (55)$$

$$= \sum_j \sum_{i \neq j} \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{r}_j}{r_{ij}^3} \quad (56)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{r}_i + (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{r}_j}{r_{ij}^3} \quad (57)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{r_{ij}^3} \quad (58)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{ij}} = E_P^{Coul} \quad (59)$$

$$(60)$$

## Limite froide pour un nuage d'ions piégés

Lorsque les particules piégées, toujours de charge  $+Q$ , sont des atomes ionisés de la famille des alcalino-terreux, on peut procéder à du refroidissement laser Doppler sur cette espèce, pour atteindre des situations où l'énergie cinétique liée à l'agitation thermique  $\overline{E_C}$  est inférieure à l'énergie potentielle du nuage par au moins 2 ordres de grandeur.

39. Donner la relation qui lie  $E_P^{Coul}$  et  $E_P^*$  dans cette limite froide.

Le théorème du viriel donne  $\overline{E_C} = -\frac{1}{2}(\overline{V_{Coul}} + \overline{V^*}) = -\frac{1}{2}(E_P^{Coul} - 2E_P^*)$ . À la limite froide,  $\overline{E_C} \ll E_P$  ce qui n'est possible que si  $E_P^{Coul} \simeq 2E_P^*$ .

Dès qu'il y a plusieurs centaines d'ions dans un nuage froid, une description continue devient pertinente, basée sur la densité moyenne de particule  $n(\mathbf{r})$  et le potentiel coulombien  $\Psi_{Coul}(\mathbf{r})$  créé en  $\mathbf{r}$  par toutes les particules chargées.

On considère que les potentiels de confinement ont été choisis pour réaliser une pseudo-énergie potentielle de la forme

$$\Psi^*(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega_r^2(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2}m\omega_r^2r^2 \quad (61)$$

pour des particules de masse  $m$  et ainsi former un nuage à symétrie sphérique. Dans la même limite d'un nuage refroidi par laser où l'énergie cinétique d'agitation thermique est négligeable, les ions forment une structure stable et l'équilibre mécanique est assuré en chaque position du nuage d'ions.

40. En exploitant l'équilibre mécanique d'une charge  $Q$  située à une distance  $r$  du centre du piège, donner l'expression de champ électrique  $\mathbf{E}_{Coul}(\mathbf{r})$  créé par l'ensemble des charges en  $\mathbf{r}$ , en fonction de  $Q$  et de  $\Psi^*(\mathbf{r})$ .

Pour qu'une particule chargée soit à l'équilibre mécanique à une distance  $r$  du centre du nuage, il faut que le bilan des forces soit nul à sa position. Il faut que la force dérivant du potentiel de confinement  $\mathbf{F}^* = -\mathbf{grad}\Psi^*(\mathbf{r})$  soit égale à l'opposé de la force de répulsion coulombienne induite par toutes les charges en  $(\mathbf{r})$  :  $Q\mathbf{E}_{Coul}(\mathbf{r})$  soit

$$Q\mathbf{E}_{Coul}(\mathbf{r}) = \mathbf{grad}\Psi^*(\mathbf{r})$$

41. En invoquant le théorème de Maxwell-Gauss, en déduire que la densité moyenne du nuage s'exprime comme

$$n(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_0}{Q^2}\Delta\Psi^*(\mathbf{r}) \quad (62)$$

et en donner la forme particulière dans le cas du potentiel sphérique de l'équation (61). Le théorème de Maxwell-Gauss dit que le champ électrique créé par une distribution de charge de densité volumique de charges  $Qn(\mathbf{r})$  est tel que  $\text{div}(\mathbf{E}_{Coul}(\mathbf{r})) = Qn(\mathbf{r})/\epsilon_0$ . On sait par ailleurs que  $\mathbf{E}_{Coul}(\mathbf{r}) = \mathbf{grad}\Psi^*(\mathbf{r})/Q$  donc

$$\text{div}(\mathbf{grad}\Psi^*(\mathbf{r})) = \Delta\Psi^*(\mathbf{r}) = \frac{Q^2n(\mathbf{r})}{\epsilon_0}$$

On a donc l'expression de la densité de particules

$$n(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_0}{Q^2}\Delta\Psi^*(\mathbf{r}) = \frac{3m\omega_r^2\epsilon_0}{Q^2} \quad (63)$$

La densité moyenne est uniforme sur toute l'étendue du nuage et nous la notons  $n_0$ .

42. Dans le cas d'un nuage formé de  $N$  ions de masse  $m$  et de charge  $Q$ , donner la relation qui relie ce nombre  $N$ , le rayon du nuage  $R$ ,  $\omega_r$ ,  $m$ ,  $Q$  et  $\epsilon_0$ . Pour une valeur typique de 100 kHz pour  $\omega_r/2\pi$ , calculer le rayon d'un nuage formé de 1000 ions mercure dont l'isotope 199 est ionisé une fois ( $Q = +e$ )?

Avec une densité moyenne uniforme sur tout le nuage, la nombre d'ions est le produit du volume du nuage par sa densité :

$$N = n_0 \frac{4\pi R^3}{3} = \frac{4\pi\epsilon_0}{Q^2} m\omega_r^2 R^3$$

Application numérique :

$$R^3 = N \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 m\omega_r^2} = N \times 0,182 \times 10^{-14} \text{ m}^3$$

Pour  $N = 1000$  ions,  $R^3 = 1,82 \times 10^{-12} \text{ m}^3$  et  $R = 122 \text{ }\mu\text{m}$ .

## Deux ions dans un piège

On piège simultanément deux ions identiques (masse  $m$  et charge  $Q$ ) dans un piège linéaire d'axe de translation  $Oz$  et tel que la pseudo-énergie potentielle de confinement est très anisotrope :  $m\omega_x^2 \gg m\omega_z^2$ , de telle sorte que les deux ions, quand ils sont refroidis par laser, restent sur l'axe  $Oz$  du piège, en position  $z_1$  et  $z_2$ .

43. Grace à un bilan des forces, donner l'expression de la distance  $l$  qui sépare les deux ions quand ils sont à leur position d'équilibre, en fonction de  $m$ ,  $Q$ ,  $\omega_z$  et  $\epsilon_0$ . Pour faciliter le calcul, on peut exploiter la symétrie du système.

De par la symétrie du système, à l'équilibre, la position des deux ions sont telles que  $z_2 = -z_1$ . On note  $l = z_2 - z_1$  et on choisit  $z_2 > 0$  donc  $z_2 = l/2$ . Le bilan des forces sur l'ion 2 donne, sur la direction  $Oz$

$$\frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 l^2} - m\omega_z^2(l/2) = 0 \quad (64)$$

Ce qui donne pour la distance qui sépare des ions

$$l = \left( \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 m\omega_z^2} \right)^{1/3} \quad (65)$$

44. Calculer cette valeur pour deux ions de calcium (isotope 40) dans un piège tel que  $\omega_z/2\pi = 100$  kHz. A.N :  $l = 26 \text{ }\mu\text{m}$
45. Même froids, les ions font de petites oscillations autour de leur position d'équilibre. En considérant que la distance  $z_2 - z_1$  qui sépare les deux ions varie peu autour de  $l$  et qu'elle peut être décrite au premier ordre comme  $(l + \epsilon)$  avec  $\epsilon \ll l$ , en écrivant l'équation de la dynamique pour chaque ion, montrer que cette distance  $z_2 - z_1$  oscille à la fréquence  $\sqrt{3}\omega_z/2\pi$ .

On écrit l'équation fondamentale de la dynamique pour chaque ion :

$$m\ddot{z}_1 = -m\omega_z^2 z_1 - \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{(z_2 - z_1)^2} \quad (66)$$

$$m\ddot{z}_2 = -m\omega_z^2 z_2 + \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{(z_2 - z_1)^2} \quad (67)$$

dont on déduit l'équation

$$m(\ddot{z}_2 - \ddot{z}_1) = -m\omega_z^2(z_2 - z_1) + 2\frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{(z_2 - z_1)^2} \quad (68)$$

Dans l'approximation où  $(z_2 - z_1) = l + \epsilon$ , cette équation peut être écrite comme

$$m\ddot{\epsilon} = -m\omega_z^2(l + \epsilon) + 2\frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{l^2(1 + \epsilon/l)^2} = -m\omega_z^2(l + \epsilon) + 2\frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 l^2}(1 - 2\epsilon/l) \quad (69)$$

En utilisant l'expression de  $l$  fournie par l'Eq.65, on simplifie 2 termes pour obtenir

$$m\ddot{\epsilon} = -3m\omega_z^2\epsilon \quad (70)$$

qui est l'équation d'évolution d'un oscillateur harmonique de pulsation  $\sqrt{3}\omega_z$ .