



## **Français : Interactions Hyperfines dans les Complexes Organiques de Lanthanide pour le Traitement de l'Information Quantique**

Dans ce manuscrit intitulé « Interactions Hyperfines dans les Complexes Organiques de Lanthanide pour le Traitement de l'Information Quantique », nous explorons l'interaction complexe entre la physique atomique et l'informatique quantique, en mettant l'accent sur les interactions hyperfines dans les complexes lanthanide-organiques et leurs applications au traitement de l'information quantique. Ce travail établit un pont entre plusieurs disciplines, notamment l'informatique quantique, la théorie du contrôle optimal, la structure nucléaire, les interactions hyperfines, les éléments f, la théorie des champs cristallins et le magnétisme moléculaire.

Nous commençons par examiner l'hamiltonien des ions lanthanides libres, en dérivant les éléments de matrice qui prennent en compte la structure électronique, le couplage spin-orbite et les interactions hyperfines. En utilisant des fonctions d'onde de type hydrogénoïde et des déterminants de Slater, nous garantissons l'antisymétrie dans les systèmes multiélectroniques, conformément au principe d'exclusion de Pauli. Le couplage spin-orbite est traité de manière perturbative, ce qui conduit à un dédoublement des structures fines, avec des éléments de matrice dérivés en utilisant des schémas de couplage du moment angulaire. Les interactions hyperfines, incluant les contributions dipolaires magnétiques et quadripolaires électriques, sont formulées pour expliquer le dédoublement des niveaux d'énergie dû aux états de spin nucléaire, essentiels pour la spectroscopie de précision et les applications en information quantique.

En transition vers les théories des champs de ligands, nous détaillons comment les ligands organiques environnants influencent la structure électronique des ions lanthanides dans les complexes. Nous comparons la théorie des champs cristallins (CFT), qui modélise les ligands comme des charges ponctuelles, et la théorie des champs de ligands (LFT), qui prend en compte la covalence et le recouvrement orbitalaire. L'hamiltonien des champs de ligands est exprimé via des expansions multipolaires, et les éléments de matrice sont dérivés grâce aux outils de la théorie quantique du moment angulaire. Des règles de sélection basées sur la symétrie des ligands sont établies, réduisant la complexité du problème. Ces concepts sont cruciaux pour comprendre la structure électronique et la spectroscopie des complexes lanthanide-organiques utilisés en informatique quantique.

Dans l'étude des interactions configurationnelles, nous approfondissons la théorie de Judd-Ofelt et ses généralisations, qui décrivent les transitions dipolaires électriques dans les complexes de lanthanides. Nous expliquons comment les paramètres impairs des champs de ligands facilitent le mélange des configurations entre différents états de parité, tels que  $4f_n$  et  $4f_n-15d_1$ , et comment ce mélange est essentiel pour comprendre l'effet Stark hyperfin observé dans les expériences. La théorie des perturbations est utilisée pour dériver des opérateurs effectifs qui rendent compte de ces transitions, fournissant un cadre théorique pour les transitions induites par interactions hyperfines dans les complexes de lanthanides.

Les corrections relativistes sont abordées à travers l'équation de Dirac, fournissant une base pour comprendre l'interaction hyperfine et calculer les constantes hyperfines. Nous prenons en compte la masse finie, la taille et les caractéristiques magnétiques des noyaux atomiques, ainsi que l'influence de ces propriétés nucléaires sur la structure hyperfine des ions lanthanides. Les calculs des constantes hyperfines incluent des corrections pour les distributions finies de charge nucléaire et de courant, en utilisant les corrections de Bohr-Weisskopf et Breit-Rosenthal.

Une partie importante du travail implique l'utilisation des électrons et des muons comme sondes nucléaires dans les ions lanthanides de type hydrogénoïde, tels que le dysprosium. En calculant les niveaux d'énergie et les constantes hyperfines pour différents isotopes et modèles nucléaires, nous démontrons que les ions muoniques offrent une sensibilité accrue aux propriétés nucléaires grâce à une plus grande pénétration de la fonction d'onde dans le noyau. Les anomalies hyperfines sont calculées, révélant la capacité de discriminer entre différents modèles nucléaires et isotopes, ce qui est précieux pour concevoir des qudits aux propriétés souhaitées.

En passant à l'informatique quantique, nous nous concentrons sur l'utilisation des spins nucléaires dans les ions lanthanides comme qudits pour le traitement de l'information quantique. Nous présentons un aperçu des qubits, des qudits et des concepts quantiques essentiels tels que les représentations des états, les portes quantiques et les échelles de temps critiques. Nous discutons des différences entre qubits et qudits, en illustrant comment les qudits, en tant que systèmes quantiques à  $d$  niveaux, peuvent représenter plus d'informations et offrir potentiellement des avantages par rapport aux qubits. L'échelle du bruit en fonction de la dimension de l'espace de Hilbert est analysée, et les conditions dans lesquelles les qudits surpassent les qubits sont dérivées.

Nous explorons la dynamique des systèmes quantiques ouverts interagissant avec un environnement sous l'hypothèse markovienne, en utilisant l'équation de Lindblad pour modéliser ces systèmes. À l'aide de la théorie des perturbations appliquée à l'équation maître de Lindblad, nous étudions les effets de la décohérence sur les opérations quantiques dans les qudits. Au-delà de l'approche de premier ordre, des corrections d'ordre supérieur sont considérées, révélant la non-linéarité de la fidélité dans les systèmes de qudits ouverts et la nécessité de tenir compte de ces corrections dans les systèmes de haute dimension.

Pour aborder la mise en œuvre des portes quantiques sur les spins nucléaires, nous utilisons la théorie du contrôle optimal pour optimiser la génération des portes et réduire les temps de porte, améliorant ainsi les performances du système. Des techniques telles que l'approximation des ondes tournantes, la décomposition en rotations de Givens et des algorithmes de contrôle optimal comme GRAPE et MAGICARP sont utilisées pour minimiser les coûts en temps et en énergie des portes quantiques dans les systèmes de haute dimension. Ces méthodes sont cruciales pour surmonter les défis associés aux temps de porte plus longs et à la décohérence accrue dans les qudits.

Enfin, le manuscrit explore les applications de la séquence mathématique de Prouhet-Thue-Morse en informatique quantique. Cette séquence est montrée comme ayant une utilité significative dans la correction d'erreurs, la conception de mémoires quantiques résistantes au bruit et l'analyse du chaos quantique. Ses propriétés permettent la construction d'états logiques satisfaisant les conditions de Knill-Laflamme pour la détection et la correction des erreurs, offrant une robustesse contre certains types d'erreurs et de déphasage.

Dans l'ensemble, ce manuscrit présente une étude exhaustive qui relie la physique atomique et l'informatique quantique, avec un accent particulier sur les interactions hyperfines dans les complexes lanthanide-organiques pour le traitement de l'information quantique. Ce travail fournit des aperçus théoriques sur les interactions complexes au sein de ces systèmes et des considérations pratiques pour faire progresser les technologies computationnelles quantiques utilisant des qubits à base de lanthanides.