

TRAVAUX DIRIGÉS DE MÉCANIQUE QUANTIQUE

olivier.legrand@unice.fr

anders.kastberg@unice.fr

olivier.alibart@unice.fr

FORMALISME MATHÉMATIQUE

Exercice 1 : Commutateurs et traces

1. Montrer que

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C \quad (1)$$

2. La trace d'un opérateur est la somme des éléments diagonaux de sa matrice représentative dans une base donnée

$$\text{Tr } A = \sum_n A_{nn} \quad (2)$$

Montrer que

$$\text{Tr } AB = \text{Tr } BA \quad (3)$$

et en déduire que la trace est invariante dans un changement de base $A \rightarrow A' = SAS^{-1}$. La trace d'un opérateur est (heureusement!) indépendante de la base.

3. Montrer que la trace est invariante par permutation circulaire

$$\text{Tr } ABC = \text{Tr } BCA = \text{Tr } CAB \quad (4)$$

Exercice 2 : Déterminant et trace1. Soit une matrice $A(t)$ dépendant d'un paramètre t vérifiant

$$\frac{dA(t)}{dt} = A(t) B$$

Montrer que $A(t) = A(0) \exp(Bt)$. Quelle est la solution de

$$\frac{dA(t)}{dt} = BA(t) ?$$

2. Montrer que

$$\det e^{At_1} \times \det e^{At_2} = \det e^{A(t_1+t_2)}$$

et que

$$\det e^A = e^{\text{Tr } A}$$

ou de façon équivalente

$$\det B = e^{\text{Tr } \ln B} \quad (1)$$

Suggestion : obtenir une équation différentielle pour l'opérateur $g(t) = \det[\exp(At)]$. Les résultats sont évidents si A est diagonalisable.**Exercice 3 : Commutateurs et valeur propre dégénérée**Soit trois matrices $N \times N$ A , B et C qui vérifient

$$[A, B] = 0 \quad [A, C] = 0 \quad [B, C] \neq 0$$

Montrer qu'au moins une valeur propre de A est dégénérée.

Exercice 4 : Matrices normales

Une matrice C est dite *normale* si elle commute avec la matrice hermitique conjuguée

$$C^\dagger C = C C^\dagger$$

En écrivant

$$C = \frac{1}{2}(C + C^\dagger) + i \frac{1}{2i}(C - C^\dagger) = A + iB$$

montrer que C est diagonalisable.

Exercice 5 : Matrices normales et décomposition spectrale (à chercher seul !)

On se propose de démontrer le théorème de décomposition spectrale d'un opérateur normal M sans faire appel à la diagonalisabilité des opérateurs hermitiques. Ainsi, comme il est aisé de montrer que les opérateurs hermitiques et les opérateurs unitaires sont normaux, le théorème de décomposition spectrale pour ces deux classes d'opérateurs en découle.

On veut donc établir le théorème suivant : Tout opérateur normal M sur un espace de Hilbert \mathcal{H} est diagonal par rapport à une base orthonormée de \mathcal{H} . Réciproquement, tout opérateur diagonalisable est normal.

1. Montrer la réciproque.

2. Pour démontrer la première proposition, on procède par induction sur la dimension d de \mathcal{H} . Soit λ une valeur propre de M , P le projecteur sur le sous-espace propre associé à λ et Q le projecteur sur le complément orthogonal à ce sous-espace. On établira d'abord que

$$M = PMP + QMQ. \quad (1)$$

Démontrer ensuite que QMQ est normal.

Par induction, QMQ est diagonal par rapport à une base orthonormée du sous-espace associé à Q et PMP est déjà diagonal par rapport à une base orthonormée du sous-espace associé à P . Il s'ensuit que $M = PMP + QMQ$ est diagonal par rapport à une base orthonormée de l'espace total.

3. Montrer qu'une matrice normale est hermitique *si et seulement si* elle possède des valeurs propres réelles.

Exercice 6 : Identités opératorielle

1. Soit l'opérateur $f(t)$ fonction du paramètre t

$$f(t) = e^{tA} B e^{-tA}$$

où les opérateurs A et B sont représentés par des matrices $N \times N$. Montrer que

$$\frac{df}{dt} = [A, f(t)] \quad \frac{d^2f}{dt^2} = [A, [A, f(t)]] \quad \text{etc.}$$

En déduire

$$e^{tA} B e^{-tA} = B + \frac{t}{1!} [A, B] + \frac{t^2}{2!} [A, [A, B]] + \dots \quad (1)$$

2. On suppose que A et B commutent tous deux avec leur commutateur $[A, B]$. Écrire une équation différentielle pour l'opérateur

$$g(t) = e^{At} e^{Bt}$$

et en déduire, par intégration entre $t = 0$ et $t = 1$, la relation

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A, B]} \quad (2)$$

Attention ! Cette identité n'est pas généralement valable. Elle n'est garantie que si $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$. Montrer également avec les mêmes hypothèses

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A, B]} \quad (3)$$

POSTULATS DE LA PHYSIQUE QUANTIQUE

Exercice 7 : Mesures quantiques et évolution temporelle

A. Mesure quantique

On considère une base orthonormée $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ où le hamiltonien H et une grandeur physique A sont représentés par les matrices :

$$H = E_0 \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad A = a \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

où E_0 et a sont des constantes positives.

1. a) On procède à une mesure de l'énergie. Quels résultats peut-on obtenir ?
 b) Diagonaliser A .
 c) On procède à une mesure de la grandeur A . Quels résultats peut-on obtenir ?
2. On prépare le système dans l'état : $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle)$.
 a) Quelle est la probabilité pour qu'une mesure de l'énergie donne $3E_0$?
 b) Si le résultat d'une telle mesure est effectivement $3E_0$, quel est l'état du système après la mesure ?
 c) Quel(s) résultat(s) donnerait *alors* une mesure de A ? Avec quelle(s) probabilité(s) ?
3. a) Quelle est la probabilité pour que l'énergie mesurée soit E_0 si le système est initialement dans l'état $|\psi\rangle$? Quel est l'état du système après la mesure ?
 b) Quels sont *alors* les résultats possibles d'une mesure de A ? Quelles sont les probabilités associées ?
 c) On suppose que la mesure de A donne $-a$. Quel est l'état du système après la mesure ?
4. On effectue un grand nombre de mesures de l'énergie sur un grand nombre de systèmes identiques tous préparés dans l'état $|\psi\rangle$. Quelle en est la moyenne ?

B. Mesure et évolution temporelle

L'évolution du vecteur d'état d'un système quantique est régie par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle . \quad (2)$$

où le hamiltonien H ne dépend pas du temps et possède une base d'états propres $\{|\phi_n\rangle\}$, i.e. $H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$, où l'on suppose que les énergies propres E_n sont non dégénérées.

1. On décompose le vecteur d'état dans cette base : $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\phi_n\rangle$.
 Trouver l'équation différentielle que doit vérifier chaque coefficient $c_n(t)$ et la résoudre.
2. Dans une base orthonormée $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$, le hamiltonien a pour matrice représentative :

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

- a) On suppose que le système est initialement dans l'état : $|\psi(0)\rangle = |3\rangle$.
 Calculer l'expression de $|\psi(t)\rangle$ dans la base $\{|\phi_0\rangle, |\phi_+\rangle, |\phi_-\rangle\}$ des états propres de H , puis dans la base initiale $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$.
- b) Quelle est la probabilité $P_2(t)$ pour que le système soit dans l'état $|2\rangle$ au temps t ?
3. On suppose maintenant que le système est initialement dans l'état : $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle)$.
 a) Calculer $|\psi(t)\rangle$ dans la base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$.
 b) A $t = t_0$ on mesure l'énergie et l'on trouve $-\hbar\omega$. Avec quelle probabilité ? Que vaut $|\psi(t)\rangle$ pour $t > t_0$?

Exercice 8 : Dispersion et vecteurs propres

Montrer qu'une condition nécessaire et suffisante pour que $|\varphi\rangle$ soit vecteur propre d'un opérateur hermitique A est que la dispersion $\Delta_\varphi A = 0$ où $(\Delta_\varphi A)^2 = \langle A^2 \rangle_\varphi - (\langle A \rangle_\varphi)^2 = \langle (A - \langle A \rangle_\varphi I)^2 \rangle_\varphi$.

Exercice 9 : Méthode variationnelle

1. Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur (non normalisé) de l'espace de Hilbert des états et un hamiltonien H . La valeur moyenne $\langle H \rangle_\varphi$ est

$$\langle H \rangle_\varphi = \frac{\langle \varphi | H | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle}$$

Montrer que si le minimum de cette valeur moyenne est obtenu pour $|\varphi\rangle = |\varphi_m\rangle$ et le maximum pour $|\varphi\rangle = |\varphi_M\rangle$, alors

$$H|\varphi_m\rangle = E_m|\varphi_m\rangle \quad \text{et} \quad H|\varphi_M\rangle = E_M|\varphi_M\rangle$$

où E_m et E_M sont la plus petite et la plus grande valeur propre.

3. Si H agit dans un espace à deux dimensions, sa forme la plus générale est

$$H = \begin{pmatrix} a+c & b \\ b & a-c \end{pmatrix}$$

où b peut toujours être choisi réel. En paramétrant $|\varphi(\alpha)\rangle$ sous la forme

$$|\varphi(\alpha)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \alpha/2 \\ \sin \alpha/2 \end{pmatrix}$$

trouver les valeurs de α_0 en cherchant les extrema de $\langle \varphi(\alpha) | H | \varphi(\alpha) \rangle$. Retrouver ainsi que les vecteurs propres de H sont

$$|\chi_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta/2 \\ \sin \theta/2 \end{pmatrix} \quad |\chi_-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \theta/2 \\ \cos \theta/2 \end{pmatrix}$$

correspondant aux valeurs propres $a + \sqrt{b^2 + c^2}$ et $a - \sqrt{b^2 + c^2}$ respectivement, l'angle θ étant défini par

$$\begin{aligned} c &= \sqrt{b^2 + c^2} \cos \theta \\ b &= \sqrt{b^2 + c^2} \sin \theta. \end{aligned}$$

On notera que $\tan \theta = b/c$, et qu'il faut prendre garde à choisir la bonne détermination de θ .

Exercice 10 : Théorème de Feynman-Hellmann

Soit un opérateur hermitique $A(\lambda)$ dépendant d'un paramètre réel λ , $a(\lambda)$ une valeur propre simple et $|\varphi(\lambda)\rangle$ le vecteur propre normalisé ($\|\varphi(\lambda)\|^2 = 1$) correspondant

$$A(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle = a(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle$$

Montrer que

$$\frac{\partial a}{\partial \lambda} = \langle \varphi(\lambda) | \frac{\partial A}{\partial \lambda} | \varphi(\lambda) \rangle \quad (1)$$

Exercice 11 : Opérateur d'évolution et représentation de Heisenberg

On considère un système dont l'hamiltonien H est indépendant du temps (système isolé). Montrer que le vecteur d'état à l'instant t , noté $|\psi(t)\rangle$, se déduit du vecteur d'état à l'instant initial $|\psi(t_0)\rangle$ par la formule :

$$|\psi(t)\rangle = U(t - t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

avec $U(\tau) = \exp[-iH\tau/\hbar]$.

1. Montrer que $U(\tau)$ est unitaire.

2. On note $|\psi(0)\rangle$ l'état de ce système à l'instant $t = 0$. On s'intéresse à la valeur moyenne $a(t)$ des résultats de mesures d'une observable A à l'instant t .

- a. Exprimer $a(t)$ en fonction de $|\psi(0)\rangle$, A et de l'opérateur d'évolution $U(t)$ introduit plus haut.
 b. Montrer que $a(t)$ peut s'interpréter comme la valeur moyenne d'un opérateur $A(t)$ dans l'état $|\psi(0)\rangle$, et que $A(t)$ est déterminé par :

$$i\hbar \frac{dA(t)}{dt} = [A(t), H] \text{ et } A(0) = A. \quad (1)$$

Cette approche est appelée représentation (ou point de vue) de Heisenberg : le vecteur d'état est indépendant du temps, et les opérateurs obéissent à l'équation de Heisenberg (1).

Exercice 12 : Point de vue de l'interaction

Un point de vue intermédiaire entre celui de Schrödinger et celui de Heisenberg est le *point de vue de l'interaction* (ou de Dirac). On l'utilise lorsqu'il est naturel de décomposer l'hamiltonien H en un hamiltonien *libre* H_0 indépendant du temps, que l'on sait diagonaliser, et un hamiltonien d'interaction $W(t)$.

L'objectif est de se débarrasser de l'évolution connue de H_0 . On définit le vecteur d'état $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ dans le point de vue de l'interaction par

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \exp[iH_0 t/\hbar]|\psi(t)\rangle \quad |\tilde{\psi}(t=0)\rangle = |\psi(t=0)\rangle$$

Le point de vue de l'interaction coïncide avec celui de Heisenberg si $W = 0$.

L'opérateur d'évolution $U(t)$ vérifie

$$i\hbar \frac{dU(t)}{dt} = [H_0 + W(t)]U(t)$$

On définit l'opérateur d'évolution $\tilde{U}(t)$ dans le point de vue de l'interaction par

$$U(t) = U_0(t)\tilde{U}(t) \quad \text{où} \quad U_0(t) = \exp[-iH_0 t/\hbar]$$

Montrer qu'on obtient l'équation d'évolution

$$i\hbar \frac{d\tilde{U}(t)}{dt} = \tilde{W}(t)\tilde{U}(t) \text{ où } \tilde{W}(t) = U_0^{-1}(t)W(t)U_0(t). \quad (1)$$

Exercice 13 : Relation d'incertitude temps-énergie

On considère un système préparé dans un état $|\psi\rangle$ dont la dispersion en énergie vaut ΔE . On considère d'autre part une observable A de valeur moyenne $\langle a \rangle$ et de dispersion Δa .

En utilisant les relations de commutation, montrer l'inégalité suivante :

$$\Delta a \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle a \rangle}{dt} \right|.$$

En déduire que si l'échelle de temps typique d'évolution d'un système est définie par $\tau = |\Delta a / (d\langle a \rangle / dt)|$, on a l'inégalité : $\tau \Delta E \geq \hbar/2$.

Exercice 14 : Évolution temporelle d'un système à deux niveaux

Pour commencer, considérons un atome qui possède deux niveaux d'énergie $+\hbar\omega$ et $-\hbar\omega$. L'hamiltonien du système s'écrit

$$H = \hbar \begin{pmatrix} \omega & 0 \\ 0 & -\omega \end{pmatrix} \quad \text{dans la base} \quad |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

En l'absence de couplage, $+\hbar\omega$ et $-\hbar\omega$ sont les énergies possibles du système, et les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont stationnaires (si l'on place le système dans l'un de ces états, il y demeure indéfiniment). Le problème consiste à évaluer les modifications qui apparaissent lorsqu'on introduit un terme de couplage $W = \hbar \begin{pmatrix} 0 & B \\ B & 0 \end{pmatrix}$ qui va permettre au système de passer d'un état à l'autre.

Notre système à deux niveaux présente donc un hamiltonien H représenté par la matrice

$$H = \hbar \begin{pmatrix} \omega & B \\ B & -\omega \end{pmatrix}$$

On rappelle que les valeurs propres et vecteurs propres de H sont

$$\begin{aligned} E_+ &= \hbar \sqrt{\omega^2 + B^2} & |\chi_+\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \\ E_- &= -\hbar \sqrt{\omega^2 + B^2} & |\chi_-\rangle &= -\sin \frac{\theta}{2} |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |-\rangle \end{aligned}$$

avec

$$\cos \theta = \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 + B^2}} \quad \sin \theta = \frac{B}{\sqrt{\omega^2 + B^2}} \quad \tan \theta = \frac{B}{\omega}$$

1. Le vecteur d'état $|\varphi(t)\rangle$ au temps t peut se décomposer sur la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

$$|\varphi(t)\rangle = c_+(t)|+\rangle + c_-(t)|-\rangle$$

Écrire le système d'équations différentielles couplées auquel obéissent les composantes $c_+(t)$ et $c_-(t)$.

2. On décompose $|\varphi(t=0)\rangle$ sur la base $\{|\chi_+\rangle, |\chi_-\rangle\}$

$$|\varphi(t=0)\rangle = |\varphi(0)\rangle = \lambda|\chi_+\rangle + \mu|\chi_-\rangle \quad |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$$

Montrer que $c_+(t) = \langle +|\varphi(t)\rangle$ s'écrit

$$c_+(t) = \lambda e^{-i\Omega t/2} \cos \frac{\theta}{2} - \mu e^{i\Omega t/2} \sin \frac{\theta}{2}$$

avec $\Omega = 2\sqrt{\omega^2 + B^2}$: $\hbar\Omega$ est la différence d'énergie entre les deux niveaux. En déduire que $c_+(t)$ (de même que $c_-(t)$) vérifie l'équation différentielle

$$\ddot{c}_+(t) + \left(\frac{\Omega}{2}\right)^2 c_+(t) = 0$$

3. On suppose que $c_+(0) = 0$. En déduire λ et μ à une phase près ainsi que $c_+(t)$. Montrer que la probabilité de trouver le système au temps t dans l'état $|+\rangle$ est

$$p_+(t) = \sin^2 \theta \sin^2 \left(\frac{\Omega t}{2}\right) = \frac{B^2}{\omega^2 + B^2} \sin^2 \left(\frac{\Omega t}{2}\right)$$

4. Montrer que si $c_+(t=0) = 1$ alors

$$c_+(t) = \cos \frac{\Omega t}{2} - i \cos \theta \sin \frac{\Omega t}{2}$$

En déduire $p_+(t)$ et $p_-(t)$, et vérifier la compatibilité du résultat avec celui de la question précédente.

SPIN 1/2, POLARISATION ET CORRÉLATIONS QUANTIQUES

Exercice 15 : Décomposition d'une matrice 2×2

1. On introduit la notation :

$$\hat{\sigma}_0 = I \quad \hat{\sigma}_i = \sigma_i, \quad i = 1, 2, 3$$

Montrer que si une matrice 2×2 A vérifie $\text{Tr}(\hat{\sigma}_i A) = 0 \quad \forall i = 0, \dots, 3$, alors $A = 0$.

2. Soit la matrice 2×2

$$A = \lambda_0 I + \sum_{i=1}^3 \lambda_i \sigma_i = \sum_{i=0}^3 \lambda_i \hat{\sigma}_i$$

Montrer que

$$\lambda_i = \frac{1}{2} \text{Tr}(A \hat{\sigma}_i)$$

En déduire qu'une matrice 2×2 quelconque peut toujours s'écrire

$$A = \sum_{i=0}^3 \lambda_i \hat{\sigma}_i$$

À quelle condition doivent obéir les coefficients λ_i lorsque A est hermitique ?

Exercice 16 : Exponentielles de matrices de Pauli

1. Montrer que

$$\exp\left(-i\frac{\theta}{2} \vec{\sigma} \cdot \hat{n}\right) = I \cos \frac{\theta}{2} - i(\vec{\sigma} \cdot \hat{n}) \sin \frac{\theta}{2}$$

Suggestion : calculer $(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^2$.

2. Une application bien instructive des matrices de rotations du type $\exp(-i\frac{\theta}{2} \vec{\sigma} \cdot \hat{n})$ consiste à voir comment construire un vecteur propre (vecteur de spin propre ici) de l'opérateur $\vec{\sigma} \cdot \hat{n}$ associé à la valeur propre $+1$ et où \hat{n} est un vecteur de direction quelconque. Suggestion : Partez du vecteur propre $+1$ de σ_z et appliquez les transformations nécessaires.

Exercice 17 : Variables cachées et spin 1/2

En physique quantique, l'état d'une particule ne peut être prédit : on connaît seulement sa probabilité d'être dans l'état a ou b . En effet, les probabilités sont associées à des systèmes quantiques individuels alors qu'en physique classique les probabilités sont associées à des ensembles et le recours aux probabilités est une façon de prendre en compte la complexité de phénomènes que nous ne pouvons pas connaître dans le détail. Par exemple, à un jeu de pile ou face, la connaissance parfaite des conditions initiales du lancer de la pièce, la prise en compte de la résistance de l'air, de la configuration du sol d'arrivée, etc. permettrait en théorie de prévoir le résultat. Quelques physiciens (de Broglie, Bohm, etc.) ont proposé que le caractère probabiliste de la physique quantique ait une origine analogue. Si nous avons accès à des variables supplémentaires, inconnues pour le moment, et appelées pour cette raison *variables cachées*, nous pourrions prédire avec certitude l'état individuel de chaque particule. Dans une théorie dite de "*variables cachées*", on introduit pour décrire un état physique en plus du vecteur d'état $|\varphi\rangle$ une variable (ou une collection de variables) λ . Un état physique est alors caractérisé par l'ensemble $\{|\varphi\rangle, \lambda\}$, et cet état physique est de dispersion nulle, ce qui veut dire que toute propriété physique possède une valeur bien déterminée. On retrouve les valeurs moyennes de la mécanique quantique en faisant une moyenne sur λ . Nous allons illustrer la notion de variable cachée sur le spin 1/2.

Nous allons construire une théorie basée sur l'existence d'une variable cachée, λ , qui traduirait l'appartenance ou non de la particule à un sous-groupe qui porte une propriété physique parfaitement définie à la mesure du spin selon \vec{u}_x . C'est donc selon la valeur de λ que la particule donnerait le résultat $+1$ ou -1 .

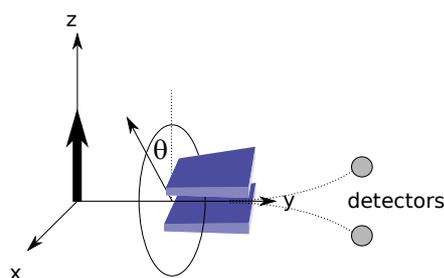


FIGURE 1 – Analyse du spin d'une particule.

C'est ensuite la statistique classique sur λ qui donnera le résultat probabiliste de la physique quantique. Dans cet exemple, la variable cachée λ vérifie $0 \leq \lambda \leq 1$ et la moyenne sur λ est donnée par une intégrale entre 0 et 1

$$\langle S_a \rangle_C = \int_0^1 d\lambda \langle S_a \rangle(\lambda)$$

Les observables associées à la mesure du spin selon une direction $i = x, y, z$ s'écrivent $\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$. Vous avez montré à l'exercice 15 que la forme générale de S associée à une mesure du spin selon une direction \hat{a} s'écrit $S_{\hat{a}} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \hat{a}$ où \hat{a} est un vecteur unitaire.

Pour notre exercice nous allons travailler dans la base définie par les vecteurs propres de σ_z $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ prendrons $|\varphi\rangle = |+\rangle$ l'état de spin 1/2 orienté selon le vecteur unitaire $\hat{u} = (0, 0, 1)$ et un vecteur unitaire d'analyse $\hat{a} = \sin(\theta)\vec{u}_x + \cos(\theta)\vec{u}_z$

1. Calculez la forme de l'opérateur S_a dans le cadre de notre expérience.
2. Pour situer les choses nous allons regarder les résultats prédits par le formalisme quantique pour deux mesures particulières : selon le vecteur $\hat{a}_1 = \vec{u}_z$ et $\hat{a}_2 = \vec{u}_x$. Calculez les résultats possibles de chaque mesure ainsi que les probabilités qui leur sont associées. Ensuite vous calculerez la valeur moyenne $\langle S_a \rangle_\varphi$ ainsi que la dispersion $(\Delta_\varphi S_a)^2$. Vous commenterez les résultats obtenus et expliquerez en quoi cela dérangeait Einstein, de Broglie, Bohm, etc.

3. On suppose que dans l'état $\{|\varphi\rangle, \lambda\}$, l'opérateur $\vec{\sigma} \cdot \hat{a}$ vaut

$$\begin{aligned} \vec{\sigma} \cdot \hat{a} &= \mathbb{I} & \text{si } 0 \leq \lambda < \lambda_A \\ \vec{\sigma} \cdot \hat{a} &= -\mathbb{I} & \text{si } \lambda_A \leq \lambda \leq 1 \end{aligned}$$

Montrez que S_a prend une forme qui ne laisse aucune ambiguïté quant au résultat d'une mesure selon \vec{u}_x et que $\langle S_a \rangle(\lambda)$ prend une valeur bien précise dans l'état $\{|\varphi\rangle, \lambda\}$. Il faut ensuite vérifier que la moyenne sur λ donne le résultat de la mécanique quantique. Comment doit-on choisir λ_A pour que la description par une variable cachée corresponde à celle fournie par la physique quantique? Commentez le résultat.

$$\int_0^1 d\lambda \langle S_a \rangle(\lambda) = \langle S_a \rangle_\varphi$$

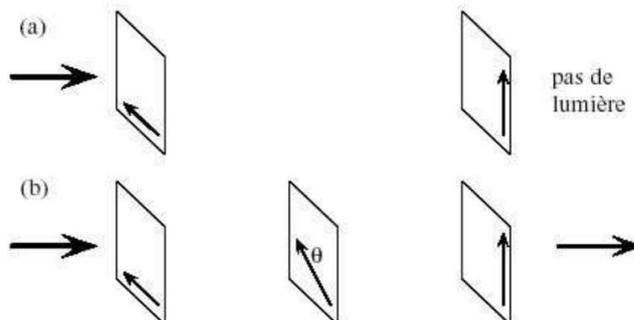
4. Si notre raisonnement statistique est correct, nous devons pouvoir l'étendre à des mesures plus complexes... par exemple à une mesure selon l'angle 45° . Calculez S_{45} puis donnez les résultats possibles de chaque mesure ainsi que les probabilités qui leur sont associées. Ensuite vous calculerez la valeur moyenne $\langle S_a \rangle_\varphi$ ainsi que la dispersion $(\Delta_\varphi S_a)^2$.

Encore une fois vous essayerez d'appliquer un raisonnement statistique à l'aide de variables cachées pour reproduire le résultat de la physique quantique. Comment doit-on choisir λ_A pour que la description par une variable cachée corresponde à celle fournie par la physique quantique?

5. En remarquant que $\langle S_{45} \rangle_\varphi = \langle \frac{S_x + S_z}{\sqrt{2}} \rangle_\varphi = \frac{\langle S_x \rangle_\varphi + \langle S_z \rangle_\varphi}{\sqrt{2}}$, refaites la comparaison des valeurs propres moyennes dans le cas de la théorie quantique et dans le cas de la théorie à variables cachées. Qu'en concluez-vous?

Commentaire : De façon analogue, von Neumann énonça un théorème en 1932 selon lequel il ne pouvait pas exister de théorie de variables cachées. Cependant une des hypothèses faites par von Neumann était l'additivité des valeurs moyennes $\langle A \rangle(\lambda) + \langle B \rangle(\lambda) = \langle A + B \rangle(\lambda)$. Malheureusement pour lui ce n'était pas une hypothèse viable et comme l'a écrit Mermin, cette hypothèse de von Neumann était stupide (*von Neumann's silly assumption*).

Exercice 18 : Un exemple de système à 2 états : la polarisation de la lumière (TD L2)



Les ondes lumineuses sont transversales. On appelle polarisation le comportement du vecteur champ électrique dans le plan transverse à la direction de propagation. Nous considérerons ici les *états de polarisation* des photons individuels qui composent un faisceau lumineux. On décrit ces états de polarisation dans un espace de Hilbert à 2 dimensions. Dans cet espace, on choisira arbitrairement comme états de base les états de polarisation linéaire suivant l'horizontale et la verticale, notés :

$$|\rightarrow\rangle \quad \text{et} \quad |\uparrow\rangle \quad .$$

Ces états sont définis physiquement par le fait que si le photon est dans l'état $|\rightarrow\rangle$, il passe à travers un polariseur idéal d'axe horizontal avec probabilité 1 et passe à travers un polariseur d'axe vertical avec probabilité 0.

On note $|\theta\rangle$ l'état d'un photon de polarisation *linéaire* dans la direction faisant un angle θ avec l'horizontale (*attention* : $0 \leq \theta < \pi$). Cet état s'écrit :

$$|\theta\rangle = \cos \theta |\rightarrow\rangle + \sin \theta |\uparrow\rangle \quad ,$$

avec des composantes réelles. S'il n'y avait que des états de polarisation linéaire, on n'aurait pas besoin d'introduire de composantes *complexes* et donc nul besoin d'espace de Hilbert. On sait cependant qu'il faut envisager en optique des états de polarisation circulaire *gauche* et *droite* :

$$|\Psi_{G,D}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\rightarrow\rangle \pm i|\uparrow\rangle) \quad .$$

1. Vérifier que ces états gardent la même forme lorsqu'on change de base d'états de polarisation linéaire.

En observant si un photon est passé ou non au travers d'un polariseur d'axe θ , on effectue une mesure qui est associée à l'opérateur A_θ projecteur sur l'état $|\theta\rangle$:

$$A_\theta = |\theta\rangle \langle \theta| \quad .$$

2. Écrire la matrice 2×2 représentant cet opérateur dans la base $\{|\rightarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$. Montrer que cet opérateur possède 2 états propres : $|\theta\rangle$ associé à la valeur propre 1, et $|\bar{\theta}\rangle$ associé à la valeur propre 0 (avec

$\bar{\theta} = \theta \pm \pi/2$, en sorte que $\langle \bar{\theta} | \theta \rangle = 0$). En particulier, calculer la probabilité qu'un photon initialement dans l'état $|\rightarrow\rangle$ passe au travers du polariseur.

3. Calculer la probabilité pour qu'un photon polarisé circulairement dans un état $|\Psi_{G,D}\rangle$ passe au travers du même polariseur. On notera que le résultat est indépendant de l'angle du polariseur.

On dispose deux polariseurs croisés comme sur la figure.

Dans le cas (a), aucune lumière n'est transmise par un ensemble de deux polariseurs d'axes perpendiculaires. Dans le cas (b), si l'on introduit un autre polariseur entre les deux polariseurs de (a), de la lumière passe au travers de l'ensemble du dispositif.

4. Dans le cas (b), calculer la probabilité P_1 qu'un photon initialement dans un état de polarisation horizontale traverse le premier polariseur, puis la probabilité P_2 qu'il soit transmis par le deuxième, enfin la probabilité P_3 qu'il traverse le dernier polariseur. En déduire la probabilité P qu'il traverse le dispositif des trois polariseurs. Pour quelles valeurs de θ s'annule cette dernière? Quel résultat obtiendrait-on si le polariseur d'axe θ était placé après le polariseur vertical? Commenter.

Exercice 19 : *Superposition quantique et mélange statistique (TD L2)*

Un système peut se trouver dans une superposition quantique de deux états, mais il est également possible que le système soit dans l'un ou l'autre des deux états affectés chacun d'une certaine probabilité. C'est la différence entre une superposition quantique d'états et un simple *mélange statistique* des états.

Soient $|\Psi_G\rangle$ et $|\Psi_D\rangle$ les deux états possibles de polarisation circulaire d'un photon (polarisation gauche et polarisation droite).

Dans une superposition quantique des deux états $|\Psi_G\rangle$ et $|\Psi_D\rangle$, le photon, en tant que système quantique, est décrit par une fonction d'onde de la forme :

$$|\Psi\rangle = c_G |\Psi_G\rangle + c_D |\Psi_D\rangle \quad (1)$$

Une mesure de son état de polarisation fera qu'on trouvera celui-ci soit dans l'état $|\Psi_G\rangle$, soit dans l'état $|\Psi_D\rangle$, avec les probabilités respectives $|c_G|^2$ et $|c_D|^2$. En revanche, on parle de mélange statistique si, par exemple, la préparation du système est faite avec une certaine indétermination par suite d'un manque d'information sur les conditions expérimentales. Ainsi le photon de l'exemple précédent peut être préparé avec une probabilité $|c_G|^2$ d'être dans l'état de polarisation gauche, $|\Psi_G\rangle$, et une probabilité $|c_D|^2$ d'être dans l'état $|\Psi_D\rangle$, de polarisation droite. Une mesure de polarisation circulaire du photon ne permettra pas de le distinguer de celui préparé dans la superposition quantique précédente, puisque, lors d'une mesure de polarisation, on trouvera également le système dans les états $|\Psi_G\rangle$ ou $|\Psi_D\rangle$ avec les mêmes probabilités que précédemment.

Il en serait de même si l'on considérait un système composé de N particules, par exemple N photons, toutes dans une superposition quantique de deux états. Cet ensemble semblerait équivalent, vis-à-vis d'une mesure classique, à N particules dont un nombre égal à $N|c_G|^2$ serait préparé dans l'état $|\Psi_G\rangle$ et le reste, égal à $N|c_D|^2$, dans l'état $|\Psi_D\rangle$.

Peut-on, malgré cela, faire des mesures permettant de distinguer une superposition d'un mélange? L'exercice suivant étudie un principe de mesure qui permet la distinction entre superposition quantique et mélange statistique.

1. Le photon étant préparé dans un état de superposition quantique $|\Psi\rangle$ donné par (1), un analyseur, positionné sur la trajectoire du photon, permet d'analyser l'état de polarisation rectiligne de celui-ci. Soient $|\rightarrow\rangle$ et $|\uparrow\rangle$ les deux états orthonormés de base associés à une polarisation rectiligne, respectivement parallèle ou perpendiculaire à un axe de référence situé dans le plan de la rotation du champ électrique. Exprimer $|\Psi\rangle$ dans cette base.

2. Déterminer les probabilités de trouver le photon, lors d'une mesure effectuée avec l'analyseur, dans un état $|\rightarrow\rangle$ ou $|\uparrow\rangle$.

3. On considère à présent un faisceau lumineux qui, par suite d'un manque d'information sur les conditions de l'expérience, a une probabilité $|c_G|^2$ de se trouver dans l'état de polarisation $|\Psi_G\rangle$, et $|c_D|^2$ dans l'état $|\Psi_D\rangle$. On utilise le même analyseur que précédemment.

Déterminer les probabilités de trouver, lors de l'analyse, le faisceau dans un état $|\rightarrow\rangle$ ou $|\uparrow\rangle$.

Exercice 20 : Téléportation quantique (TD L2)

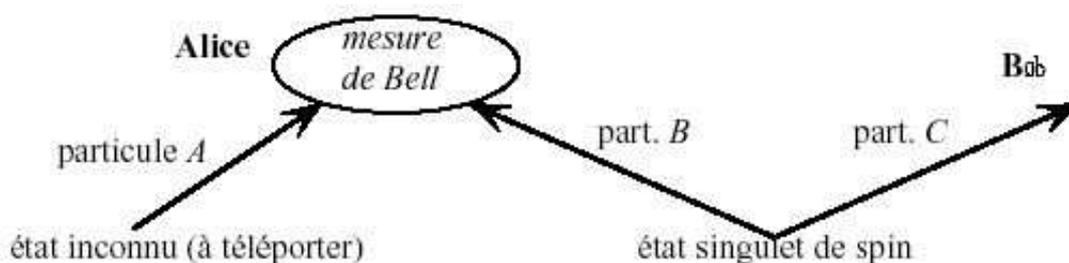
Alice dispose d'une particule A de spin $1/2$, dans un état de spin qu'elle souhaite téléporter vers Bob :

$$\alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$$

avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Alice et Bob disposent également d'une paire de particules B et C de spin $1/2$, préparées dans l'état dit *singulet* (cf. figure) :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|B:+;C:-\rangle - |B:-;C:+\rangle)$$



1. Alice effectue une mesure de l'état de spin de AB qui projette cet état sur un des quatre vecteurs de la base de Bell de AB (cf. exercice précédent). Écrire l'état de spin du système formé des trois particules A , B et C en faisant apparaître explicitement la base de Bell pour le système AB . Quelles sont les probabilités des quatre résultats possibles ?
2. On suppose qu'Alice trouve la paire AB dans l'état $|\Phi_-\rangle$. Quel est l'état de spin de la particule C après cette mesure ?
3. En déduire le principe de la téléportation.
4. Ce principe peut-il être utilisé pour transmettre une information d'Alice vers Bob plus rapidement que par des voies classiques (et donc limitées par la vitesse de la lumière) ?

Exercice 21 : Mesures de Bell (TD L2)

On considère un système formé de deux particules de spin $1/2$, dont l'état de spin le plus général s'écrit :

$$\alpha|+;+\rangle + \beta|+;-\rangle + \gamma| -;+\rangle + \delta| -;-\rangle \quad (1)$$

avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$.

1. On fait une mesure du spin de chaque particule selon l'axe z . Quels sont les résultats de mesure et leur probabilité ?
2. Plutôt que la mesure précédente, on effectue une mesure qui projette l'état de spin des deux particules sur un des quatre états de la base de Bell :

$$\begin{aligned} |\Psi_+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+;+\rangle + |-;-\rangle) & |\Phi_+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+;-\rangle + |-;+\rangle) \\ |\Psi_-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+;+\rangle - |-;-\rangle) & |\Phi_-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+;-\rangle - |-;+\rangle) \end{aligned}$$

- i) Vérifier que cette base est orthonormée.
 ii) Quelle est la probabilité de chacun des quatre résultats possibles ?

Exercice 22 : Mesures de Bell suite...

L'intrication est un phénomène fondamental de la physique quantique dans lequel l'état quantique de deux systèmes doit être décrit globalement, sans pouvoir séparer un système de l'autre, bien qu'ils puissent être spatialement séparés. Dans ce cas, il existe des corrélations entre les propriétés physiques observées des deux systèmes qui ne peuvent pas être expliquées à partir des propriétés individuelles de chacun des deux objets S1 et S2. En conséquence, même s'ils sont séparés par de grandes distances spatiales, les deux systèmes ne sont pas indépendants et il faut considérer $\{S1 + S2\}$ comme un système unique.

Quelques rappels en prenant des systèmes de dimension 2 : Application à la polarisation des photons
 Prenons deux photons dont la polarisation peut être décrite par un vecteur d'état de dimension 2 définis dans deux espaces de Hilbert \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}_2 : $|\psi_1\rangle = \alpha_1|H\rangle_1 + \beta_1|V\rangle_1$ et $|\psi_2\rangle = \alpha_2|H\rangle_2 + \beta_2|V\rangle_2$. Le système des deux photons peut se décrire dans un espace de Hilbert de dimension 4 correspondant au produit tensoriel $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ sous la forme :

$$|\Psi_{1+2}\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = \alpha_1\alpha_2|H_1H_2\rangle + \beta_1\alpha_2|V_1H_2\rangle + \alpha_1\beta_2|H_1V_2\rangle + \beta_1\beta_2|V_1V_2\rangle$$

Ces états sont appelés états séparables ou factorisables. Le système S1 est dans un état quantique clairement identifié, qui n'est pas altéré par les mesures effectuées sur S2. À titre d'exemple, l'état

$$|\Psi_{sep}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|H_1V_2\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|V_1V_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - |V\rangle)_1 \otimes |V\rangle_2$$

est un état séparable, puisqu'il peut être factorisé comme indiqué ci-dessus.

Toutefois, la forme la plus générale possible pour un système à deux photons s'écrit :

$$|\Psi_{1+2}\rangle = \alpha|H_1H_2\rangle + \beta|H_1V_2\rangle + \gamma|V_1H_2\rangle + \delta|V_1V_2\rangle$$

et cette écriture prévoit l'existence de d'états non séparables, qui s'écrivent par exemple :

$$|\Psi_{int}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|H_1V_2\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|V_1H_2\rangle$$

Ces états¹ sont dits "intriqués" et portent des corrélations impossibles à reproduire classiquement.

Bell, physicien déterministe convaincu, montra, dans un article paru en 1964, qu'il était possible de répondre expérimentalement aux questions soulevées par les deux différentes interprétations, quantique (dite "orthodoxe") d'une part et déterministe d'autre part, par le biais des inégalités qui portent son nom. Ses inégalités portent sur la fonction de corrélation de l'expérience qui relève les coïncidences entre les résultats donnés par les deux détecteurs mesurant les polarisation des photons étudiés. Son inégalité définit une valeur maximale qu'une théorie local à variable cachée permet d'atteindre.

Dans notre exercice, la variable cachée pourrait être un ingénieux système mécanique qui selon le résultat d'un simple pile ou face, oriente l'envoi d'une paire de photons polarisés horizontalement vers le détecteur 1 et verticalement vers le détecteur 2 ($|H_1V_2\rangle$) ou l'inverse ($|V_1H_2\rangle$). Ce système "classique" sera décrit par un mélange purement statistique de paires de photons dans l'état $|H_1V_2\rangle$ ou $|V_1H_2\rangle$, le comportement probabiliste étant dicté par la variable cachée. Nous allons donc conduire des calculs en considérant soit des paires de photons intriqués en polarisation $|\Psi_{int}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H_1V_2\rangle + |V_1H_2\rangle)$ ou un mélange statistique de paires de photons dans l'état $\{|H_1V_2\rangle, p = 1/2\}$ ou $\{|V_1H_2\rangle, p = 1/2\}$ afin de comparer les résultats auxquels s'attendre².

L'objectif est de calculer la probabilité d'obtenir une coïncidence sur la paire de détecteurs $|+-\rangle$ en fonction des angles $\theta_{1,2}$ des analyseurs de polarisation $P_{1,2}$.

1. Outils de mesure

1. Il est intéressant de noter que cet état n'est pas mathématiquement factorisable sous la forme $|\Psi_{1+2}\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$
 2. Pour un exemple de réalisation expérimental voir "Martin *et al.*, arXiv :1007.4358v2 [quant-ph]".

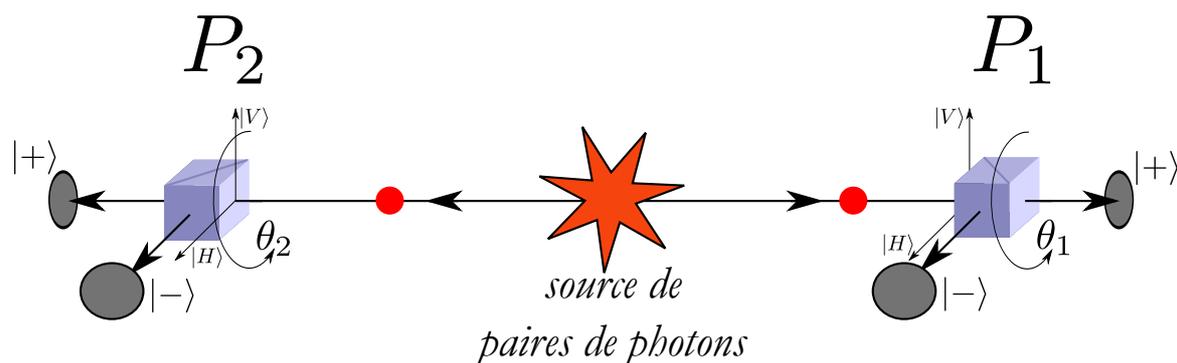


FIGURE 2 – Schématisation de l'expérience de violation des inégalités de Bell.

Les analyseurs de polarisation réfléchissent les photons polarisés selon leur axe horizontal $|-\rangle$ et transmettent ceux dont la polarisation est alignée verticalement $|+\rangle$. L'opérateur de mesure associé à ces analyseurs lorsqu'ils sont placés à 0° s'écrit comme suit :

$$P_i = |-_i\rangle\langle H_i| + |+_i\rangle\langle V_i| \quad \text{avec } i = 1, 2$$

Pour connaître la forme de l'opérateur de mesure pour n'importe quel angle θ , il faut utiliser l'opérateur rotation qui s'écrit quant à lui :

$$R(\theta) = \cos(\theta)|+\rangle\langle +| + \sin(\theta)|-\rangle\langle +| - \sin(\theta)|+\rangle\langle -| + \cos(\theta)|-\rangle\langle -| = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$$

- (i) Calculer quel que soit l'angle θ , la forme des opérateurs de mesure $P_{1,2}(\theta) = R(\theta)P_{1,2}$.
- (ii) En particulier, calculer la forme de $P_2(0)$ et $P_2(45)$.

2. Mesures dans la base à 0°

Le principe de la mesure est de faire tourner l'analyseur $P_1(\theta_1)$ en maintenant fixe la position de $P_2(\theta_2)$ à 0° et d'enregistrer pour chaque angle θ_1 la probabilité d'obtenir une coïncidence.

Dans le cas d'un mélange statistique de $|HV\rangle$ et $|VH\rangle$

- (iii) Calculer dans cette configuration la probabilité qu'un état $|HV\rangle$ donne une coïncidence sur les détecteurs $|+-\rangle$ en fonction de θ_1 .
- (iv) Calculer dans cette configuration la probabilité qu'un état $|VH\rangle$ donne une coïncidence sur les détecteurs $|+-\rangle$ en fonction de θ_1 .
- (v) Finalement, donner la fonction qui donne la probabilité d'obtenir une coïncidence pour notre mélange statistique.

Dans le cas d'un état intriqué de la forme $\frac{1}{\sqrt{2}}(|HV\rangle + |VH\rangle)$

- (vi) Calculer dans cette configuration la probabilité que l'état $\frac{1}{\sqrt{2}}(|HV\rangle + |VH\rangle)$ donne une coïncidence sur les détecteurs $|+-\rangle$ en fonction de θ_1 .

3. Mesures dans la base à 45°

Le principe de la mesure est de faire tourner l'analyseur $P_1(\theta_1)$ en maintenant fixe la position de $P_2(\theta_2)$ à 45° et d'enregistrer pour chaque angle θ_1 la probabilité d'obtenir une coïncidence.

Dans le cas d'un mélange statistique de $|HV\rangle$ et $|VH\rangle$

- (viii) Calculer dans cette configuration la probabilité qu'un état $|HV\rangle$ donne une coïncidence sur les détecteurs $|+-\rangle$ en fonction de θ_1 .
- (ix) Calculer dans cette configuration la probabilité qu'un état $|VH\rangle$ donne une coïncidence sur les détecteurs $|+-\rangle$ en fonction de θ_1 .
- (x) Finalement, donner la fonction qui donne la probabilité d'obtenir une coïncidence pour notre mélange statistique.

Dans le cas d'un état intriqué de la forme $\frac{1}{\sqrt{2}}(|HV\rangle + |VH\rangle)$

- (xi) Calculer dans cette configuration la probabilité que l'état $\frac{1}{\sqrt{2}}(|HV\rangle + |VH\rangle)$ donne une coïncidence sur les détecteurs $|+-\rangle$ en fonction de θ_1 .

Exercice 23 : Atome à deux niveaux et sphère de Bloch

Dans le contexte des oscillations de Rabi, on prend comme hamiltonien d'interaction

$$H_1(t) = -\frac{1}{2}\hbar\omega_1 [\sigma_x \cos(\omega t - \phi) - \sigma_y \sin(\omega t - \phi)]$$

Autrement dit, par rapport à la situation étudiée dans le cours, on introduit un déphasage ϕ du champ de radiofréquences. Bien sûr ϕ ne peut pas avoir de signification absolue (pourquoi?), mais ce qui peut jouer un rôle est le déphasage entre deux oscillations. Montrer que ce hamiltonien s'écrit dans le référentiel tournant

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{2}\hbar\omega_1 [\sigma_x \cos \phi + \sigma_y \sin \phi]$$

Montrer qu'à la résonance l'opérateur d'évolution dans le référentiel tournant $\exp(-i\hat{H}_1 t/\hbar)$ correspond à une rotation d'angle $-\omega_1 t$ autour d'un axe \hat{n} du plan xOy

$$\hat{n} = (\cos \phi, \sin \phi, 0)$$

Exercice 24 : Les franges de Ramsey en spectroscopie — Application aux horloges atomiques

Les horloges atomiques ont été mises au point dès le milieu des années 1950. Leur précision et leur stabilité sont telles qu'elles constituent aujourd'hui les étalons de temps (ou de fréquence). Depuis la Conférence générale des poids et mesures de 1967, "la seconde est la durée de 9 192 631 770 périodes de la radiation correspondant à la transition entre les deux niveaux hyperfins de l'état fondamental de l'atome de césium 133". Les deux niveaux en question correspondent aux deux orientations relatives possibles (parallèle ou anti-parallèle) du moment magnétique de l'électron externe et du moment magnétique du noyau.

On excite un jet atomique à la fréquence ω , voisine de la fréquence de Bohr ω_{12} d'un atome à deux niveaux, notés 1 pour le fondamental et 2 pour l'état excité. On posera $\delta = \omega - \omega_{12}$. On sonde ensuite la population du niveau 2. Si la durée d'excitation est suffisamment courte par rapport à la durée de vie du niveau 2 (due à l'émission spontanée), on peut négliger les processus de relaxation pendant le temps d'excitation. Dans la suite de ce problème, on négligera tout processus de relaxation dans le calcul. Pour décrire l'interaction d'un atome à deux niveaux avec un rayonnement micro-onde, nous allons utiliser un traitement semi-classique : Le rayonnement est traité classiquement (champ électrique oscillant classique) tandis que l'atome est traité quantiquement.

Expérimentalement, un atome de Césium dans un état de Rydberg traverse une cavité micro-onde R où règne un champ électrique oscillant $\mathcal{E}(t) = E_0 \cos(\omega t - \Phi)$. L'atome est décrit par un hamiltonien

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

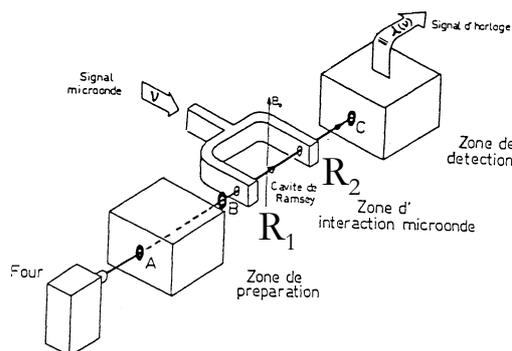


FIGURE 3 – Horloge atomique.

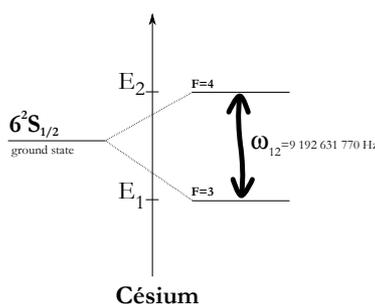


FIGURE 4 – Niveaux atomiques du Césium utilisés pour la définition de la seconde.

et nous prendrons un hamiltonien d'interaction $H_I(t)$ dépendant du temps qui agit comme une perturbation sur l'hamiltonien de l'atome au repos :

$$H_I(t) = \begin{pmatrix} 0 & d \cdot \mathcal{E}(t) \\ d \cdot \mathcal{E}(t) & 0 \end{pmatrix}$$

où d est le moment dipolaire de la transition. **1.** Justifiez pourquoi nous allons chercher les solutions sous la forme $|\Psi(t)\rangle = c_1(t)e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}}|1\rangle + c_2(t)e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}|2\rangle$

2. En utilisant l'approximation des champs tournants, montrez que les équations d'évolution de $c_1(t)$, $c_2(t)$ s'écrivent :

$$i \frac{dc_1(t)}{dt} = \frac{\Omega}{2} e^{i(\delta t - \Phi)} c_2(t) \tag{1}$$

$$i \frac{dc_2(t)}{dt} = \frac{\Omega}{2} e^{-i(\delta t - \Phi)} c_1(t) \tag{2}$$

où $\Omega = \frac{dE_0}{\hbar}$ est la fréquence de Rabi. On supposera que nous avons $\Omega \ll \omega_{12}$. Dans un premier temps nous allons nous intéresser au concept d'impulsion de Rabi π et $\pi/2$ et allons nous placer à la résonance $\delta = 0 \Leftrightarrow \omega = \omega_{12}$

3. Montrez que si les conditions initiales à $t = 0$ sont $c_1(0) = 1$, $c_2(0) = 0$ alors

$$c_1(t) = \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \quad \text{et} \quad c_2(t) = -ie^{i\Phi} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right)$$

4. Le temps de passage τ de l'atome à travers la cavité est choisi tel que $\tau = \frac{\pi}{2\Omega}$. Montrez que si l'atome entre dans la cavité dans l'état $|\Psi\rangle = |1\rangle$, il en sort dans l'état (à une phase globale près)

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle - ie^{i\Phi} e^{-i\omega_{12}\tau} |2\rangle)$$

Le temps de passage 2τ de l'atome à travers la cavité est choisi tel que $2\tau = \frac{\pi}{\Omega}$. Montrez que si l'atome entre dans la cavité dans l'état $|\Psi\rangle = |1\rangle$, il en sort dans l'état (à une phase globale près)

$$|\Psi\rangle = |2\rangle$$

Vous tacherez de donner une explication aux termes d'impulsion $\pi/2$ et π .

5. Dans le schéma expérimental de la figure 3, on applique deux impulsions successives $\pi/2$ séparées par un temps T , qui n'est autre que le temps mis par l'atome pour aller de la cavité micro-onde $R1$ à $R2$. Une erreur souvent commise dans l'excitation en champs séparés est de mal traiter l'évolution libre. Montrez que si $\Phi = 0$ pour la cavité micro-onde $R1$, on doit prendre $\Phi = -\omega(T + \tau)$ pour $R2$. En déduire que si l'atome entre dans $R1$ dans l'état $|1\rangle$, il sort de $R2$ dans l'état

$$|\Psi\rangle = -ie^{i\omega_{12}(T+2\tau)}|2\rangle$$

Nous allons maintenant considérer le cas non résonnant ($\delta \neq 0$) mais nous nous placerons pour ces questions dans les conditions de validité d'un traitement perturbatif en considérant $\Omega \ll \delta$.

6. Les atomes initialement dans le niveau 1, sont éclairés par une impulsion de champ électromagnétique (supposée rectangulaire) de durée 2τ , qui correspond à une fréquence de Rabi Ω . On étudie la population du niveau 2, en fonction de l'écart à la résonance δ . Quelle est la forme du profil observé? Quelle est sa largeur à mi-hauteur?

7. On éclaire maintenant les atomes par deux impulsions successives de durée τ , dont les centres sont séparés par un temps T (excitation en champs séparés). On étudie la population du niveau 2, en fonction de l'écart à la résonance δ . Quelle est la forme du profil observé? Quelle est sa largeur à mi-hauteur? Quel intérêt présente cette technique en terme de mesure? Cette forme vous rappelle-t-elle d'autres phénomènes physiques?

On se place maintenant dans les conditions les plus générales ($\delta \neq 0$ et Ω quelconque). Nous définissons au préalable la fréquence de Rabi généralisée $\Omega^* = \sqrt{\Omega^2 + \delta^2}$

8. Montrez qu'avec les conditions initiales $c_1(0) = 1$, $c_2(0) = 0$ alors après la première impulsion nous avons

$$c_1(t) = \frac{e^{i\delta t/2}}{\Omega^*} \left[\Omega^* \cos\left(\frac{\Omega^* t}{2}\right) - i\delta \sin\left(\frac{\Omega^* t}{2}\right) \right] \quad (3)$$

$$c_2(t) = -\frac{i\Omega}{\Omega^*} e^{i(\Phi - \delta t/2)} \sin\left(\frac{\Omega^* t}{2}\right) \quad (4)$$

9. Montrez qu'avant la deuxième impulsion, en prenant $\Phi = 0$ nous avons

$$c_1(t) = \frac{e^{i\delta t/2}}{\Omega^*} \left[\Omega^* \cos\left(\frac{\Omega^* t}{2}\right) - i\delta \sin\left(\frac{\Omega^* t}{2}\right) \right] \quad (5)$$

$$c_2(t) = -\frac{i\Omega}{\Omega^*} e^{-i\delta t/2} \sin\left(\frac{\Omega^* t}{2}\right) e^{-i\omega_{12}T} \quad (6)$$

10. Pour les très courageux, montrez qu'après la deuxième impulsion, l'amplitude de la fonction d'onde pour le niveau 2 s'écrit (en prenant cette fois $\Phi = -\omega T$) :

$$c_2(t) = -\frac{i\Omega}{\Omega^*} e^{-i\delta t} \sin\left(\frac{\Omega^* t}{2}\right) \left[\left[\cos\left(\frac{\Omega^* t}{2}\right) - i\frac{\delta}{\Omega^*} \sin\left(\frac{\Omega^* t}{2}\right) \right] + \left[\cos\left(\frac{\Omega^* t}{2}\right) + i\frac{\delta}{\Omega^*} \sin\left(\frac{\Omega^* t}{2}\right) \right] e^{-i\delta T} \right]$$

Sinon expliquez simplement comment le calcul doit être conduit...

OPÉRATEURS X ET P , MÉCANIQUE ONDULATOIRE**Exercice 25 : Valeurs moyennes et variance**

On considère la fonction d'onde à une dimension $\psi(x) = 2/a \sin(\pi x/a)$ si $0 \leq x \leq a$, et $\psi(x) = 0$ autrement.

Calculer $\langle x \rangle$, Δx , $\langle p \rangle$, Δp et le produit $\Delta x \Delta p$

Exercice 26 : L'énergie cinétique moyenne est toujours positive

Vérifier que pour toute fonction d'onde $\psi(x)$, la valeur moyenne $\langle p^2 \rangle$ est positive.

Exercice 27 : Fonctions d'onde réelles

Soit une fonction d'onde $\psi(x)$ réelle. Montrer que $\langle p \rangle = 0$.

Exercice 28 : Translation dans l'espace des impulsions

Considérons une fonction d'onde à une dimension $\psi(x)$ telle que $\langle p \rangle = p_0$ et $\Delta p = \sigma$. Que valent $\langle p \rangle$ et Δp pour la fonction d'onde

$$\psi(x)e^{ip_1 x/\hbar} ?$$

Exercice 29 : Inégalités de Heisenberg

1. Soit $\varphi(x)$ une fonction de carré sommable normalisée à l'unité et $I(\alpha)$ la quantité positive ou nulle

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left| x\varphi(x) + \alpha \frac{d\varphi}{dx} \right|^2 \geq 0$$

α étant un nombre réel.

En intégrant par parties, montrer que

$$I(\alpha) = \langle X^2 \rangle - \alpha + \alpha^2 \langle K^2 \rangle$$

où $K = -i\hbar d/dx$ et

$$\langle X^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 |\varphi(x)|^2 \quad \langle K^2 \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi^*(x) \frac{d^2 \varphi}{dx^2}$$

En déduire

$$\langle X^2 \rangle \langle K^2 \rangle \geq \frac{1}{4}$$

2. Comment faut-il modifier le raisonnement de la question précédente pour obtenir l'inégalité de Heisenberg

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2} ?$$

Montrer que $\Delta x \Delta k = 1/2$ implique que $\varphi(x)$ est une gaussienne

$$\varphi(x) \propto \exp\left(-\frac{1}{2} \sigma^2 x^2\right)$$

Exercice 30 : Étalement du paquet d'ondes

1. Montrer que $[P^2, X] = -2i\hbar P$

2. Soit $\langle X^2 \rangle(t)$ la position quadratique moyenne dans l'état $|\varphi(t)\rangle$

$$\langle X^2 \rangle(t) = \langle \varphi(t) | X^2 | \varphi(t) \rangle$$

Montrer que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle X^2 \rangle(t) &= \frac{1}{m} \langle PX + XP \rangle \\ &= \frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dx x \left[\varphi \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} - \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right] \end{aligned}$$

Ces résultats sont-ils valables si le potentiel $V(x) \neq 0$?

3. Montrer que si la particule est libre ($V(x) = 0$)

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle X^2 \rangle(t) = \frac{2}{m^2} \langle P^2 \rangle = 2v_1^2 = \text{cste}$$

4. Dédurre de ces résultats

$$\langle X^2 \rangle(t) = \langle X^2 \rangle(t=0) + \xi_0 t + v_1^2 t^2 \quad \xi_0 = \frac{d\langle X^2 \rangle}{dt}$$

ainsi que l'expression de $(\Delta x(t))^2$

$$(\Delta x(t))^2 = (\Delta x(t=0))^2 + [\xi_0 - 2v_0 \langle X \rangle(t=0)]t + (v_1^2 - v_0^2)t^2$$

avec $v_0 = \langle P/m \rangle = \text{cste}$.

Exercice 31 : Paquet d'ondes gaussien

1. On suppose que la fonction $A(k)$ du paquet d'ondes

$$\varphi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) \exp(ikx - i\omega(k)t)$$

est une gaussienne

$$A(k) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(k - \bar{k})^2}{2\sigma^2}\right]$$

Montrer que $\int |A(k)|^2 dk = 1$, que $\Delta k = \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma$ et que la fonction d'onde

$$\varphi(x, t=0) = \frac{\sigma^{1/2}}{\pi^{1/4}} \exp\left[i\bar{k}x - \frac{1}{2}\sigma^2 x^2\right]$$

Tracer la courbe représentative de $|\varphi(x, t=0)|^2$. Quelle est la largeur de cette courbe? Identifier la dispersion Δx et vérifier que $\Delta x \Delta k = 1/2$.

2. Calculer $\varphi(x, t)$. Montrer que si $\hbar\sigma^2 t/m \ll 1$ on a

$$\varphi(x, t) = \exp(i\omega(\bar{k})t) \varphi(x - v_g t, 0) \quad v_g = \frac{\hbar\bar{k}}{m}$$

3. Calculer exactement $\varphi(x, t)$

$$\varphi(x, t) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \sigma' \exp\left[i\bar{k}x - i\omega(\bar{k})t - \frac{1}{2}\sigma'^2(x - v_g t)^2\right]$$

avec

$$\frac{1}{\sigma'^2} = \frac{1}{\sigma^2} + \frac{i\hbar t}{m}$$

et en déduire $|\varphi(x, t)|^2$. Montrer que

$$\Delta x^2(t) = \frac{1}{2\sigma^2} \left(1 + \frac{\hbar^2 \sigma^4 t^2}{m^2} \right)$$

Donner l'interprétation physique du résultat.

4. Un neutron sort d'un réacteur nucléaire avec une longueur d'onde de 0.1 nm. On suppose que sa fonction d'onde à $t = 0$ est un paquet d'ondes gaussien de largeur $\Delta x = 1$ nm. Au bout de combien de temps la largeur du paquet d'ondes aura-t-elle doublé? Quelle distance aura parcouru le neutron?

Exercice 32 : Retard à la réflexion

1. L'équation $B = -(\kappa + ik)/(\kappa - ik)$ donne le coefficient de l'onde réfléchie quand une onde incidente $\exp(ikx)$ arrive sur une marche de potentiel avec une énergie $E = \hbar^2 k^2 / (2m) < V_0$, V_0 étant la hauteur de la marche de potentiel, κ étant donné par $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/(\hbar^2)}$. Montrer que $|B| = 1$ et que B peut s'écrire $B = \exp(-i\phi)$. Déterminer ϕ et $d\phi/dE$.

2. On suppose que l'onde incidente est un paquet d'ondes du type

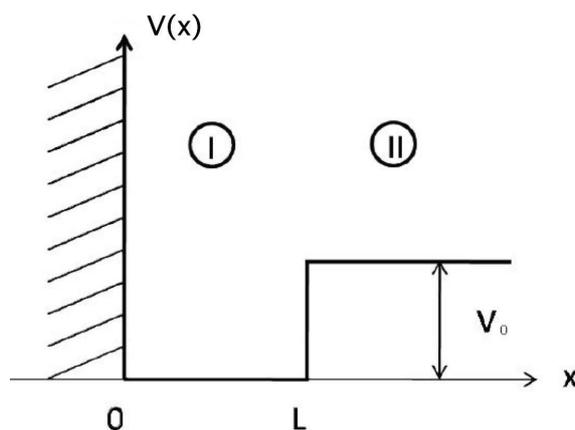
$$\varphi(x, t) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} A(k) \exp(ikx - i\omega(k)t)$$

Quel sera le paquet d'ondes réfléchi? En déduire que la réflexion se fait avec un retard

$$\tau = -\hbar \frac{d\phi}{dE} > 0$$

Exercice 33 : Puits asymétrique

On se propose d'étudier les niveaux d'énergie d'une particule placée dans un puits de potentiel $V(x)$ asymétrique, comme montré sur la Figure ($V(x) = \infty$ pour $x < 0$, $V(x) = 0$ si $0 \leq x \leq L$ et $V(x) = V_0$ si $x > L$).



1. On s'intéresse à un état propre du Hamiltonien d'énergie $E > 0$. Donner l'expression de la fonction d'onde dans les régions I) et II) (pour la région II on pourra distinguer deux cas : $E > V_0$ et $E < V_0$).

2. Nous considérons d'abord le cas d'un état lié.

a) Quelle condition doit vérifier son énergie E pour qu'un état soit lié?

b) Quelles sont les conditions que doit vérifier la fonction d'onde en $x = 0$ et $x \rightarrow +\infty$? Simplifier alors les expressions de la question 1.

c) Ecrire les conditions de raccordement de la fonction d'onde en $x = L$. En déduire l'équation de quantification de l'énergie (on ne cherchera pas à la résoudre).

3. On revient au cas d'un état de diffusion (non lié).

a) Quelle forme prend, dans ce cas, la fonction d'onde dans la région II (la forme de la fonction d'onde dans la zone I reste la même que pour un état lié) ?

b) Ecrire les conditions de raccordement en $x = L$. L'énergie est elle encore quantifiée ?

Exercice 34 : Potentiel en fonction δ

On considère un potentiel à une dimension de la forme

$$V(x) = \frac{\hbar^2 g}{2m} \delta(x)$$

m étant la masse de la particule soumise au potentiel. Ce potentiel donne parfois une approximation commode pour certains calculs. Par exemple il peut représenter une barrière de potentiel de largeur a et de hauteur V_0 , dans la limite où $a \rightarrow 0$ et $V_0 \rightarrow \infty$, le produit $V_0 a$ restant constant et égal à $\hbar^2 g / (2m)$. Dans le cas d'une barrière (potentiel répulsif), $g > 0$, mais on peut aussi modéliser un puits (potentiel attractif), auquel cas $g < 0$.

1. Montrer que g a pour dimension l'inverse d'une longueur.

2. La fonction $\varphi(x)$ obéit à l'équation de Schrödinger

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + g \delta(x) \right] \varphi(x) = \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x)$$

Montrer que la dérivée de $\varphi(x)$ vérifie au voisinage de $x = 0$

$$\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-) = g \varphi(0) \quad \varphi(0^\pm) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^\pm} \varphi(\varepsilon)$$

Supposant $g < 0$, montrer qu'il existe un état lié et un seul. Déterminer son énergie et la fonction d'onde correspondante. Montrer que l'on retrouve les résultats en prenant la limite du puits carré avec $V_0 a \rightarrow \hbar^2 |g| / (2m)$ et $a \rightarrow 0$.

3. Modèle pour une molécule diatomique. Supposant toujours $g < 0$, on modélise très grossièrement le potentiel auquel est soumis un électron d'une molécule diatomique par

$$V(x) = \frac{\hbar^2 g}{2m} [\delta(x+l) + \delta(x-l)]$$

La droite des noyaux est prise comme axe des x et les deux noyaux sont situés en $x = -l$ et $x = +l$. Montrer que l'on peut classer les solutions de l'équation de Schrödinger en solutions paires et impaires. Si la fonction d'onde est paire, montrer qu'il existe un seul état lié donné par

$$\kappa = \frac{|g|}{2} (1 + e^{-2\kappa l}) \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

Tracer qualitativement sa fonction d'onde.

Si la fonction d'onde est impaire, déterminer l'équation donnant l'énergie des états liés

$$\kappa = \frac{|g|}{2} (1 - e^{-2\kappa l})$$

Existe-t-il toujours un état lié ? Sinon, quelle condition faut-il imposer ? Tracer qualitativement la fonction d'onde lorsqu'il y a un état lié.

4. Puits double et effet tunnel. On suppose que $\kappa l \gg 1$. Montrer que les deux états liés constituent un système à deux niveaux dont le hamiltonien est

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$$

et relier A à \sqrt{T} , où T est le coefficient de transmission par effet tunnel entre les deux puits.

5. Barrière de potentiel. On s'intéresse maintenant au cas $g > 0$, qui modélise une barrière de potentiel. Calculer directement la matrice de passage et montrer qu'elle est bien la limite de celle de la barrière carrée si $V_0 a \rightarrow g$ et $a \rightarrow 0$. Donner l'expression du coefficient de transmission.

6. Potentiel périodique. Un électron se déplaçant dans un cristal à une dimension est soumis à un potentiel périodique de période l que l'on modélise par

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2 g}{2m} \delta(x - nl)$$

Pour fixer les idées, on prendra $g > 0$. Montrer que la périodicité du potentiel entraîne que la fonction d'onde, étiquetée par q , est de la forme

$$\varphi_q(x - l) = e^{-iq l} \varphi_q(x)$$

Suggestion : examiner l'action de l'opérateur T_l qui effectue une translation de l . On peut donc se restreindre à l'étude de l'intervalle $[-l/2, l/2]$. En dehors du point $x = 0$, les fonctions d'onde sont des exponentielles complexes

$$\begin{aligned} -\frac{l}{2} \leq x < 0 & \quad \varphi_q(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ 0 < x \leq \frac{l}{2} & \quad \varphi_q(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \end{aligned}$$

Utiliser les conditions sur $\varphi'(x)$ pour obtenir

$$\cos ql = \cos kl + \frac{g}{2k} \sin kl$$

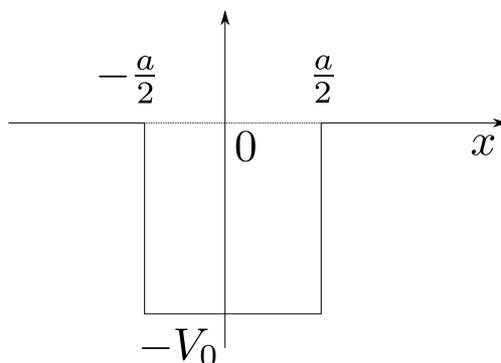
Montrer qu'il existe des régions interdites pour l'énergie. Tracer qualitativement l'énergie E_q en fonction de q .

Exercice 35 : Transmission par un puits

1. Montrer que le coefficient de transmission T par le puits carré de largeur a : $V(x) = -V_0$ pour $|x| < a/2$ et $V = 0$ ailleurs, vaut

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{q^2}{2kk'}\right)^2 \sin^2 k'a}$$

où $q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$, $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ et $k' = \sqrt{\frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}}$.



Montrer que T passe par un maximum si la longueur d'onde de de Broglie dans le puits $\lambda' = 2\pi/k'$ est de la forme $2a/n$, n entier.

2. Tracer qualitativement les courbes donnant T et le coefficient de réflexion $1 - T$.

Ce comportement explique, entre autres, l'effet Ramsauer-Townsend³. En effet, en 1921, Ramsauer avait constaté que pour certaines valeurs particulières de l'énergie incidente, des gaz rares comme l'hélium, l'argon ou le néon, étaient parfaitement transparents à des faisceaux d'électrons de *basse* énergie.

3. Pour l'hélium, l'énergie incidente à laquelle se produit le phénomène est $E = 0,7$ eV. En supposant que le rayon de l'atome d'hélium est $a/2 = 10^{-10}$ m, calculer la profondeur V_0 du puits de potentiel à l'intérieur de l'atome.

4. Comment se comporte le coefficient de transmission T lorsque l'énergie E tend vers zéro ? Lorsqu'on envoie des atomes d'hydrogène très lents sur une surface d'hélium liquide, on constate que ces atomes rebondissent élastiquement au lieu d'être adsorbés. Interpréter qualitativement ce phénomène.

Exercice 36 : Fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique

En mécanique ondulatoire, le hamiltonien de l'oscillateur harmonique s'écrit

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \quad (1)$$

En définissant la variable sans dimension u

$$q = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} u \quad -i\hbar \frac{d}{dq} = -i(\hbar m\omega)^{1/2} \frac{d}{du} \quad (2)$$

le hamiltonien (1) devient

$$H = \frac{1}{2} \hbar\omega \left[-\frac{d^2}{du^2} + u^2 \right] \quad (3)$$

Il serait possible de chercher directement les solutions de

$$H\varphi_n(u) = \frac{1}{2} \hbar\omega \left[-\frac{d^2}{du^2} + u^2 \right] \varphi_n(u) = E_n \varphi_n(u) \quad (4)$$

avec $\varphi_n(u) = \langle u|n\rangle$, mais nous nous limiterons ici à montrer l'unicité du vecteur fondamental $|0\rangle$.

1. Montrer que, comme $\langle u|0\rangle = \varphi_0(u)$, l'équation $a|0\rangle = 0$ devient

$$\langle u|a|0\rangle = \left[u + \frac{d}{du} \right] \varphi_0(u) = 0$$

qui s'intègre immédiatement en

$$\varphi_0(u) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-u^2/2} \quad (5)$$

Le facteur $\pi^{-1/4}$ assure que φ_0 est normalisée à l'unité. Cette solution est unique, ce qui prouve que les vecteurs propres donnés par la série

$$|0\rangle, (a^\dagger)^1|0\rangle, (a^\dagger)^2|0\rangle, \dots, (a^\dagger)^n|0\rangle \dots \quad (6)$$

sont non dégénérés. Vérifier que $\varphi_0(u)$ obéit à (4) avec la valeur propre $\hbar\omega/2$. La fonction $\varphi_0(u)$ vérifie bien la propriété caractéristique de la fonction d'onde d'un état fondamental : elle ne s'annule pas, ou de façon équivalente, elle n'a pas de noeuds.

2. Déterminons enfin la forme explicite des fonctions d'onde $\varphi_n(u) = \langle u|n\rangle$. Multiplions à gauche l'expression

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\hat{Q} - i\hat{P} \right)^n |0\rangle$$

par le bra $\langle u|$

$$\varphi_n(u) = \langle u|n\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(u - \frac{d}{du} \right)^n e^{-u^2/2} \quad (7)$$

3. cf. Lévy-Leblond et Balibar[1984], page 314.

Les fonctions $\varphi_n(u)$ sont orthogonales pour $n \neq n'$ et normalisées à l'unité en raison de $\langle n|n' \rangle = \delta_{nn'}$. Les fonctions définies dans l'équation (7) sont reliées aux *polynômes de Hermite* $H_n(u)$

$$e^{-u^2/2} H_n(u) = \left(u - \frac{d}{du} \right)^n e^{-u^2/2} \quad (8)$$

par

$$\varphi_n(u) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-u^2/2} H_n(u) \quad (9)$$

Calculer les trois premiers polynômes de Hermite.

Exercice 37 : Fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique

Un oscillateur harmonique de masse m et de fréquence ω est soumis à une perturbation caractérisée par le potentiel suivant

$$V = \lambda * 1/2m\omega^2 X^2$$

où $\lambda \ll 1$ et X l'opérateur position. Calculez par la méthode des perturbations les valeurs propres de l'Hamiltonien et comparez avec les valeurs exactes données par

$$E_n(\lambda) = \hbar\omega\sqrt{1+\lambda} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

MOMENT ANGULAIRE

Exercice 38 : Propriétés de \vec{J}

Vérifier par un calcul explicite que $[\vec{J}^2, J_z] = 0$. Vérifier également les identités

$$[J_0, J_{\pm}] = \pm J_{\pm} \quad (1)$$

$$[J_+, J_-] = 2J_0 \quad (2)$$

$$\vec{J}^2 = \frac{1}{2}(J_- J_+ + J_+ J_-) + J_0^2 \quad (3)$$

$$J_+ J_- = \vec{J}^2 - J_0(J_0 - 1) \quad (4)$$

$$J_- J_+ = \vec{J}^2 - J_0(J_0 + 1) \quad (5)$$

Exercice 39 : Rotation d'un moment angulaire

Soit \mathcal{R} la rotation $\mathcal{R}(\theta, \phi) = \mathcal{R}_z(\phi)\mathcal{R}_y(\theta)$ d'angles (θ, ϕ) . Vérifier que le vecteur

$$U(\mathcal{R})|jm\rangle = e^{-i\phi J_z} e^{-i\theta J_y} |jm\rangle$$

est vecteur propre de l'opérateur

$$J_x \sin \theta \cos \phi + J_y \sin \theta \sin \phi + J_z \cos \theta = \vec{J} \cdot \hat{n}$$

avec la valeur propre m ; \hat{n} est le vecteur unitaire dans la direction (θ, ϕ) .

Exercice 40 : Moments angulaires $j = \frac{1}{2}$ et $j = 1$

1. Retrouver à partir de $\langle j'm' | J_{\pm} | jm \rangle = [j(j+1) - mm']^{1/2} \delta_{j'j} \delta_{m', m \pm 1}$ les opérateurs S_x , S_y et S_z du spin 1/2.

2. Toujours à partir de $\langle j'm' | J_{\pm} | jm \rangle = [j(j+1) - mm']^{1/2} \delta_{j'j} \delta_{m', m \pm 1}$, calculer les matrices 3×3 représentatives de J_x , J_y et J_z pour le moment angulaire $j = 1$.

Exercice 41 : Moment angulaire orbital

1. Utiliser les relations de commutation canoniques

$$[X_i, P_j] = i \delta_{ij} I$$

et l'expression $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$ pour montrer

$$[L_x, L_y] = iL_z$$

2. Démontrer les équations

$$L_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (1)$$

$$L_{\pm} = i e^{\pm i\phi} \left(\cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \mp i \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (2)$$

$$\vec{L}^2 = - \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (3)$$

Suggestion : montrer que pour une rotation infinitésimale d'angle $d\alpha$ autour de Ox , les angles θ et ϕ varient de

$$d\theta = -\sin \phi d\alpha \quad d\phi = -\frac{\cos \phi}{\tan \theta} d\alpha$$

En déduire L_x et $L_y = i[L_x, L_z]$.

3. Comme $L_z = -i\partial/\partial\phi$, on pourrait s'attendre à une inégalité de Heisenberg

$$\Delta\phi \Delta L_z \geq \frac{1}{2}$$

Or dans un état propre de L_z où m est fixé, $\Delta L_z = 0$, tandis que $\Delta\phi \leq 2\pi$, puisque $0 \leq \phi \leq 2\pi$ et l'inégalité de Heisenberg est violée dans cet état. Pourquoi le raisonnement de l'exercice (24) est-il en défaut ?

Exercice 42 : Relation entre les matrices de rotation et les harmoniques sphériques

1. Soit $\varphi(\vec{r}) = \varphi(x, y, z)$ la fonction d'onde d'une particule. Montrer que

$$(e^{-i\alpha L_z} \varphi)(0, 0, z) = \varphi(0, 0, z)$$

et en déduire que si une particule est localisée sur l'axe Oz , la composante z de son moment angulaire orbital est nulle. Interpréter qualitativement ce résultat.

2. On suppose que le moment angulaire orbital de la particule est l et on écrit sa fonction d'onde comme le produit d'un harmonique sphérique et d'une fonction d'onde radiale $g_l(r)$ qui ne dépend que de $r = |\vec{r}|$

$$\psi_{lm}(\vec{r}) = Y_l^m(\theta, \phi) g_l(r) = \langle \theta, \phi | lm \rangle g_l(r)$$

On s'intéresse uniquement à la partie angulaire. En utilisant

$$|\theta, \phi\rangle = U(\mathcal{R})|\theta = 0, \phi = 0\rangle$$

où \mathcal{R} est la rotation d'angles (θ, ϕ) , montrer que

$$Y_l^m(\theta, \phi) \propto [D_{m0}^{(l)}(\theta, \phi)]^*$$

où $D_{m' m}^{(j)}[\mathcal{R}(\theta, \phi)] = \langle jm' | e^{-i\phi J_z} e^{-i\theta J_y} | jm \rangle$.

On peut montrer que le coefficient de proportionnalité est $\sqrt{(2l+1)/(4\pi)}$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} [D_{m0}^{(l)}(\theta, \phi)]^*$$

Exercice 43 : Indépendance de l'énergie par rapport à m

En supposant le potentiel $V(r)$ invariant par rotation, soit ψ_{lm} une solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$H\psi_{lm} = E_{lm}\psi_{lm}$$

Utiliser la relation de commutation $[L_+, H] = 0$ pour montrer que l'énergie E_{lm} est en fait indépendante de m .

Exercice 44 : Puits sphérique

1. Soit le potentiel $V(\vec{r})$ à symétrie sphérique :

$$\begin{aligned} V(\vec{r}) &= -V_0 & 0 \leq r \leq R \\ &= 0 & r > R \end{aligned}$$

appelé puits sphérique. Établir l'équation donnant les états liés dans l'onde s ($l = 0$). Y a-t-il toujours un état lié ? Comparer avec le cas du puits à une dimension.

2. On modélise le potentiel neutron-proton par un puits sphérique de rayon $R \simeq 2$ fm. Il existe un seul état lié neutron-proton dans l'onde s , le deutéron⁴, dont l'énergie de liaison est $B \simeq 2.2$ MeV. Calculer la

4. En fait le deutéron a aussi une petite composante d'onde d .

profondeur V_0 du puits nécessaire pour qu'il y ait juste un état lié. Comparer V_0 avec l'énergie de liaison et montrer que $V_0 \gg B$.

3. Trouver les niveaux d'énergie dans l'onde s d'une particule dans le potentiel

$$V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r} \quad A, B > 0$$

Exercice 45 : Défaut quantique des niveaux très excités du sodium

On veut calculer les niveaux d'énergie de certains états très excités (dits niveaux de Rydberg) du sodium. L'étude spectroscopique des niveaux très excités ($n \gg 1$) des alcalins a permis à Rydberg d'établir expérimentalement que l'énergie de ces niveaux est de la forme :

$$E_{n,l} = -\frac{E_I}{(n - \delta_l)^2} \quad (1)$$

où $E_I = \hbar^2/(2m_e a_0^2)$ et δ_l est un nombre, appelé *défaut quantique*, qui, en première approximation ne dépend que de l et est inférieur à 1 ou de l'ordre de 1. On peut alors supposer que l'hamiltonien d'un tel atome peut s'écrire comme celui de l'atome d'hydrogène auquel on rajoute un hamiltonien de perturbation (une correction) qui permette de prendre en compte les différences entre l'atome d'hydrogène et l'atome de sodium.

Le but de ce problème est d'étudier parmi divers hamiltoniens de perturbation possibles, celui qui permet d'interpréter au mieux les résultats expérimentaux sur δ_l . On considère que l'atome alcalin est constitué d'un cœur, formé du noyau et des électrons internes, de charge globale $+q_e$ et dont le rayon est de l'ordre du rayon de Bohr a_0 , et d'un électron externe de charge $-q_e$. L'hamiltonien décrivant la dynamique de l'électron externe est supposé de la forme :

$$H = H_0 + H'$$

où

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

est l'hamiltonien *non perturbé* de l'atome d'hydrogène et où H' est l'hamiltonien de *perturbation*, i.e. une petite correction supposée de la forme

$$H' = -\frac{B_p q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r^p}$$

où p est un entier supérieur ou égal à 2 et B_p une constante mesurant la force de l'interaction non coulombienne.

1) Dire pourquoi H' commute avec le moment angulaire orbital \vec{L} . En déduire que les éléments de matrice de H' sont de la forme :

$$\langle nlm | H' | n'l'm' \rangle = H'_{nl} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

où les $|nlm\rangle$ sont les états propres de l'atome d'hydrogène.

Suggestion : on tirera profit de l'action des opérateurs \vec{L}^2 , L_{\pm} et L_z .

2) Retrouver ce résultat en exprimant l'élément de matrice $\langle nlm | H' | n'l'm' \rangle$ en termes des fonctions propres de l'atome d'hydrogène écrites comme produits de fonctions d'onde radiale et angulaire.

3) Déduire des questions précédentes que tous les sous-niveaux d'un niveau n associés à un nombre quantique orbital l sont déplacés (par rapport au niveau non perturbé de l'atome d'hydrogène) d'une même quantité notée $\Delta E_{n,l}$ qui ne dépend que de n et de l .

Rappel : La théorie des perturbations stationnaires permet de déduire les corrections aux valeurs propres en diagonalisant la restriction de l'hamiltonien de perturbation H' au sous-espace de Hilbert associé à une valeur propre particulière de l'hamiltonien non perturbé H_0 .

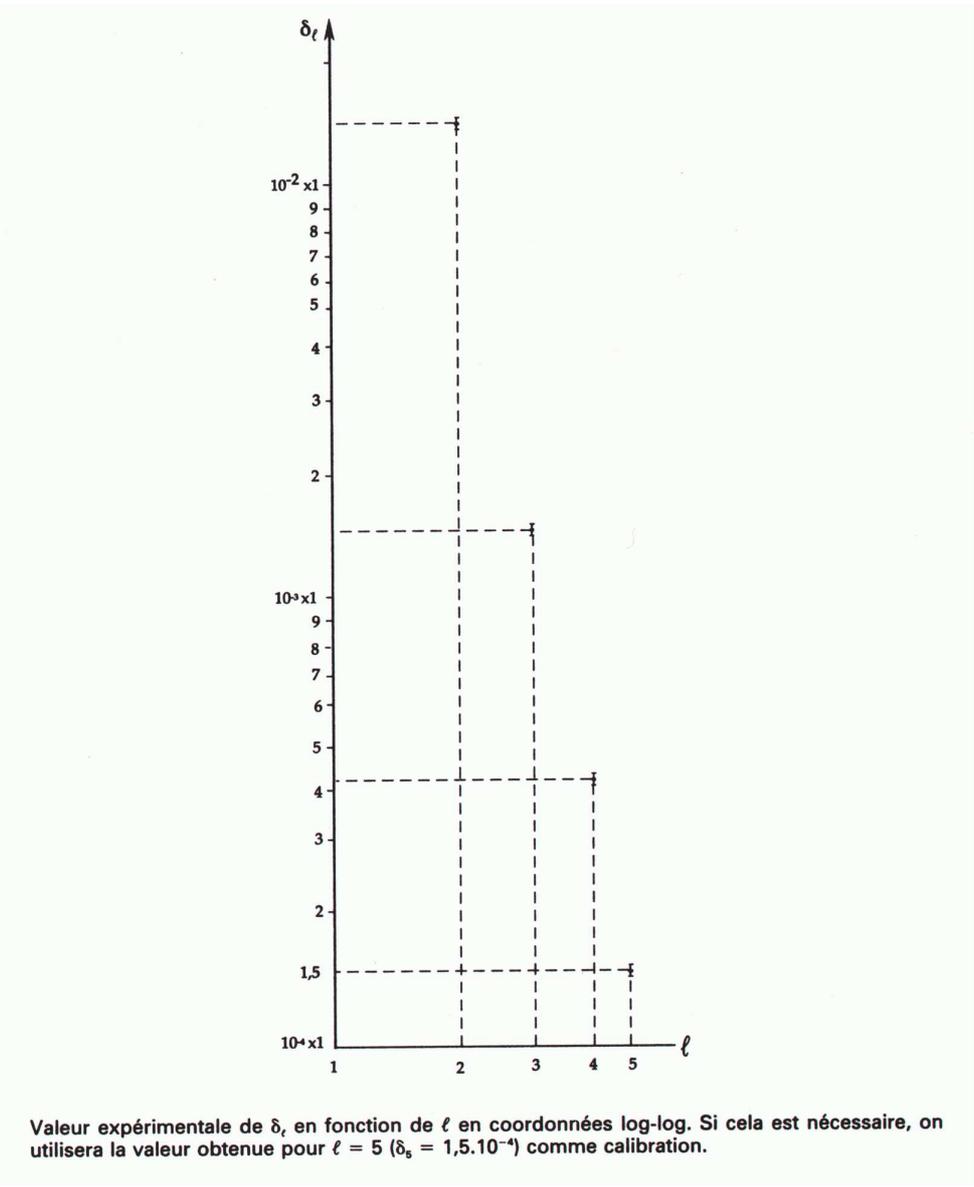
4) Exprimer $\Delta E_{n,l}$ en fonction de n , l , B_p , $q_e^2/4\pi\epsilon_0$ et a_0 dans les cas où $p = 2, 3$ et 4 .

On donne les valeurs moyennes :

$$\begin{aligned} \langle nlm | \frac{1}{r^2} | nlm \rangle &= \frac{2}{(2l+1)n^3 a_0^2} \quad , \\ \langle nlm | \frac{1}{r^3} | nlm \rangle &= \frac{2}{l(l+1)(2l+1)n^3 a_0^3} \quad , \\ \langle nlm | \frac{1}{r^4} | nlm \rangle &= \frac{4}{(2l-1)(2l+1)(2l+3)n^3 a_0^4} \left[\frac{3}{l(l+1)} - \frac{1}{n^2} \right] \quad . \end{aligned}$$

5) En déduire les valeurs théoriques du défaut quantique δ_l pour $p = 2, 3$ et 4 en supposant qu'il est légitime d'effectuer un développement limité de l'expression (1) au premier ordre en δ_l lorsque $n \gg l$. Montrer que, dans la limite $n \gg l \gg 1$, δ_l est de la forme b_p/l^γ où b_p est une constante dépendant de p . Que vaut l'exposant γ pour $p = 2, 3$ et 4 ?

6) Les défauts quantiques, obtenus expérimentalement, des niveaux d, f, g et h ($l = 2, 3, 4$ et 5) du sodium sont portés en fonction de l sur la figure ci-jointe (noter les échelles logarithmiques sur les deux axes). Avec quelle valeur de p ces données expérimentales s'accordent-elles le mieux ? (*Suggestion* : utiliser $\ln \delta_l = -\gamma \ln l + \ln b_p$)



Exercice 46 : Etats liés dans un potentiel harmonique à 3D

1. Méthode 1.

Ecrire le potentiel en coordonnées cartésiennes et rechercher les solutions de $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ sous la forme $\psi(\vec{r}) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$. Calculer l'énergie du fondamental et des 3 premiers niveaux excités et étudier leur dégénérescence.

2. Méthode 2.

Montrer que l'hamiltonien commute avec \vec{L} et rechercher $|\psi\rangle$ sous la forme de vecteurs propres communs à H , \vec{L} et L_z . En écrivant l'équation radiale pour $u_{n,l}(r)$ et en suivant une méthode analogue à celle utilisée pour l'atome d'hydrogène, on aboutit au résultat :

$$E_{p,l} = (4p + 2l + 3)E_0, \quad p = 0, 1, 2, \dots$$

Calculer l'énergie du fondamental et des 3 premiers niveaux excités et étudier leur dégénérescence.

Exercice 47 : Densité de niveaux

1. Calculer la densité de niveaux d'énergie $\mathcal{D}(E)$ en dimension $d = 2$. Montrer qu'elle est indépendante de E .

2. Calculer directement le nombre de niveaux $\Phi(E)$ dont l'énergie est inférieure à E , en comptant le nombre de niveaux possibles dans une sphère de rayon $|p| = \sqrt{2mE}$ dans l'espace des impulsions, et en prenant garde aux conditions aux limites.

Retrouver l'expression $\mathcal{D}(E) = \frac{\sqrt{m}}{2\pi^2\hbar^3}(2mE)^{1/2}$ par $\mathcal{D}(E) = \frac{d\Phi(E)}{dE}$.

Exercice 48 : Règle d'or de Fermi

1. *Comparaison avec la formule de Rabi.* Dans un système à deux niveaux, la formule de Rabi donne exactement la probabilité de transition entre deux niveaux sous l'effet d'une perturbation harmonique, par exemple

$$p_{+\rightarrow-}(t) = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2 \frac{\Omega t}{2} \quad \Omega^2 = [(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2]^{1/2}$$

Montrer que la formule approchée

$$c_n(t) = e^{-iE_n t/\hbar} \gamma_n(t) \tag{1}$$

s'obtient comme la limite de la formule de Rabi si

- $|\omega - \omega_0| \gg \omega_1$, c'est-à-dire loin de la résonance
- ou si $\omega_1 t \ll 1$, c'est-à-dire pour des temps assez courts.

2. *Potentiel constant.* Donner l'expression de l'amplitude $\gamma^{(1)}(t)$ et de la probabilité de transition par unité de temps Γ lorsque le potentiel W est indépendant du temps en utilisant la *théorie des perturbations dépendant du temps* au premier ordre.