



Mécanique Quantique

David Carpentier / Laboratoire de Physique de l'ENSL / david.carpentier@ens-lyon.fr

- ♦ Plan « évolutif » : j'attends vos retours !
- ♦ « Poly » de David Lopez-Cardozo sur portail des études

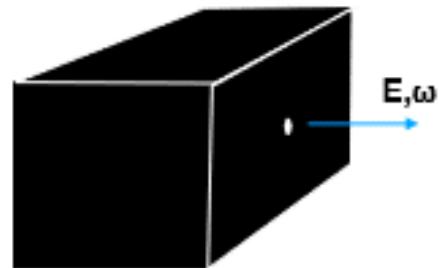
- ♦ Pourquoi la mécanique quantique ?
 - ▶ Révolution conceptuelle du XXeme siècle
 - ➡ Au delà de la Mécanique de Newton (*particules*)
 - ➡ Au delà de l'Electromagnétisme de Maxwell (*ondes*)
 - ➡ Une nouvelle théorie cadre de la Physique moderne!
 - ▶ Révolution industrielle!
 - ➡ Plus de 50% du PIB des pays développés découle directement d'une technologie basée sur la physique quantique. (laser, transistor, nucléaire, imagerie médicale...)

Débuts de la Mécanique Quantique

- » Rayonnement du corps noir – Planck, Kirchhoff
- » Effet photo-électrique – Einstein, Millikan
- » Onde de matière – de Broglie, Davisson & Germer

Rayonnement du corps noir

Rayonnement électromagnétique à l'intérieur ou entourant un corps en équilibre thermodynamique avec son environnement



La matière émet du rayonnement électromagnétique : conversion de l'énergie thermique d'un corps en énergie électromagnétique (rayonnement thermique).

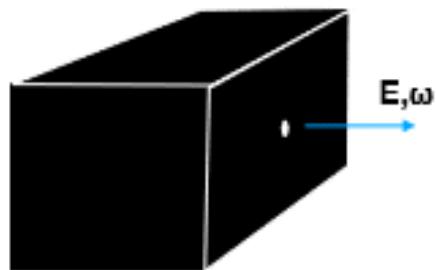
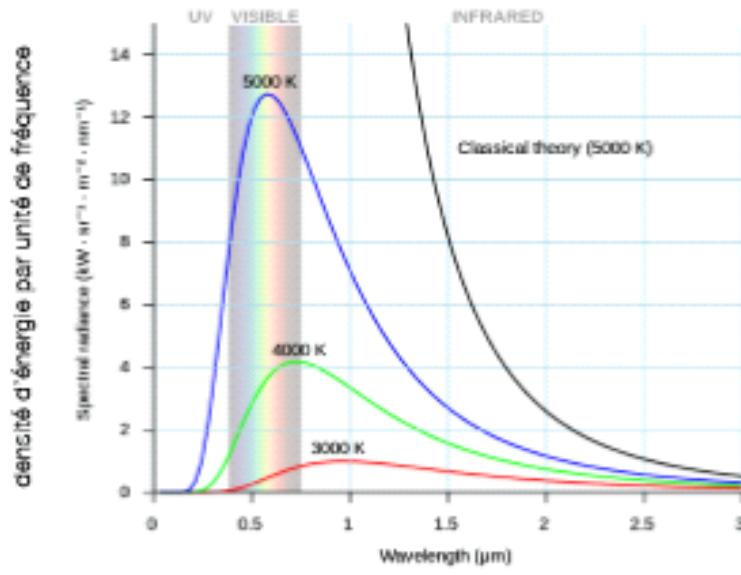
Inversement, toute matière ordinaire吸orbe (une partie) du rayonnement électromagnétique. Un objet qui吸orbe **toute** la radiation qu'il reçoit, dans toutes les longueurs d'onde, est appelé **corps noir**.

Lorsqu'un corps noir est à une température uniforme, son émission possède une distribution spectrale d'énergie qui dépend de la température. Cette émission est appelée **rayonnement du corps noir**.

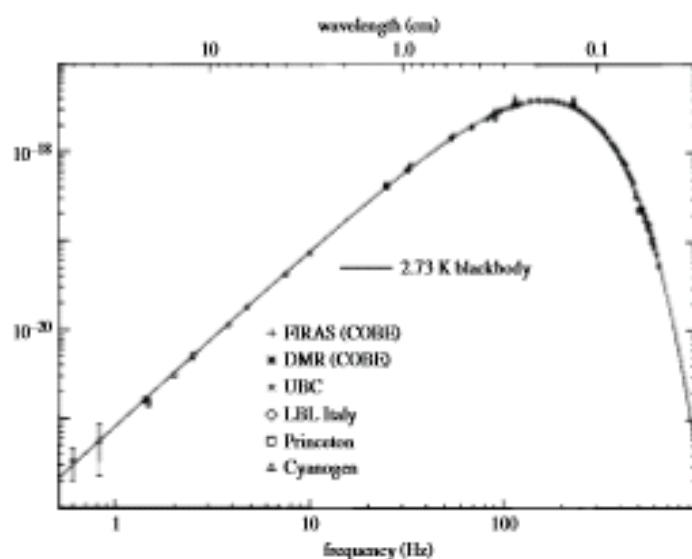
ok : Univers à 3K métale.

Rayonnement du corps noir

Au fur et à mesure que la température diminue, le sommet de la courbe de rayonnement du corps noir se déplace à des intensités plus faibles et des longueurs d'onde plus grandes. Le diagramme de rayonnement du corps noir est comparé avec le modèle classique de Rayleigh et Jeans.



Rayonnement du corps noir : rayonnement fossile

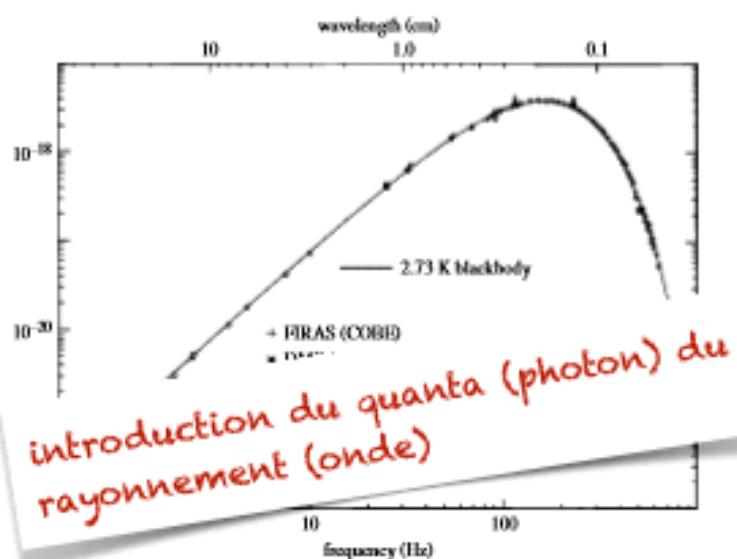


Le rayonnement à 3K fossile de l'univers. L'intensité de rayonnement en $\text{W m}^{-2} \text{ sr}^{-1} \text{ Hz}^{-1}$ est représenté en fonction de la fréquence.

Un accord remarquable est trouvé avec la loi de Planck pour $T = 2,73 \text{ K}$.

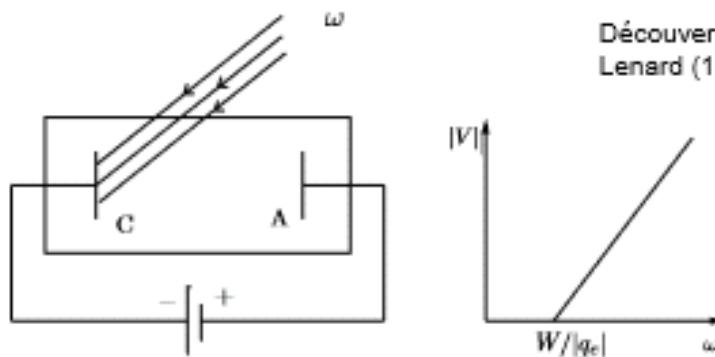
Extrait de J. Rich, Fundamentals of Cosmology, New York: Springer (2001).

Rayonnement du corps noir : rayonnement fossile



Le rayonnement à 3K fossile de l'univers. L'intensité de rayonnement en $\text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{Hz}^{-1}$ est représenté en fonction de la fréquence.
Un accord remarquable est trouvé avec la loi de Planck pour $T = 2,73 \text{ K}$.
Extrait de J. Rich, Fundamentals of Cosmology, New York: Springer (2001).

Effet photo-électrique : expérience de Millikan



Découvert par Hertz 1887, étudié par Lenard (1899) et Millikan (1902)

► Seuil en fréquence pour l'apparition d'un courant $|V| > V_0$

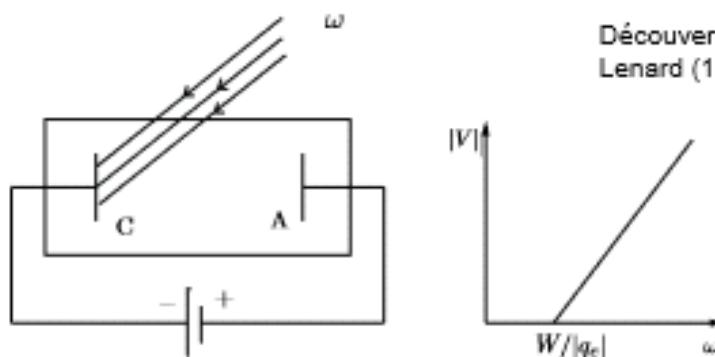
► Energie des électrons : $E_e = h\omega - W$

► Aucun courant si $|eV| > E_e$
c'est-à-dire si $|V| > V_0 = \frac{E_e}{e} = \frac{h}{e}\omega - \frac{W}{e}$

Même valeur de h : confirme l'hypothèse d'Einstein (1905)

→ bonne question d'Einstein sur la temporalité
→ check quand on a mesuré c

Effet photo-électrique : expérience de Millikan



Découvert par Hertz 1887, étudié par Lenard (1899) et Millikan (1902)

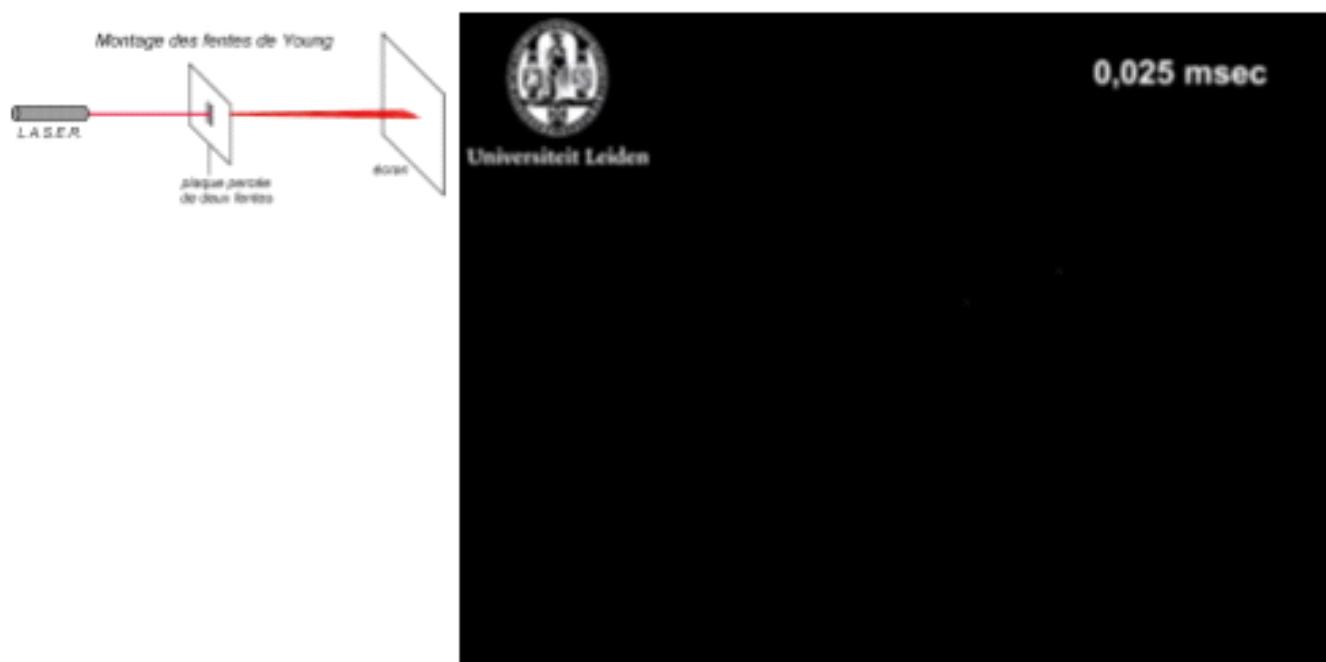
- ▶ Seuil en fréquence pour l'apparition d'un courant $|V| > V_0$
 - ▶ Energie des électrons : $E_e = h\omega - W$
 - ▶ Aucun courant si $|eV| > E_e$
 - c'est-à-dire si $|V| > V_0 = \frac{E_e}{e} = \frac{h}{e}\omega - \frac{W}{e}$
-
- ▶ rayonnement électromagnétique (onde) composé de quanta (photon, le nom date de 1926 !)
 - ▶ contredit l'électromagnétisme (l'équation d'onde est continue)

Débuts de la Mécanique Quantique

- » Rayonnement du corps noir - Planck, Kirchhoff
- » Effet photo-électrique - Einstein, Millikan
- » Onde de matière - de Broglie, Davisson & Germer

rayonnement électromagnétique
(onde) composé de quanta
(photon)

Interférences avec des photons



Film capturé par une caméra CCD amplifiée. Le film consiste en 200 plans, pour des temps d'exposition allant de 0,025 millisecondes à 6,000 millisecondes. Il montre comment des photons individuels, transmis à travers une fente double, forment une figure d'interférence.

Débuts de la Mécanique Quantique

- ▶ Rayonnement du corps noir - Planck, Kirchhoff
- ▶ Effet photo-électrique - Einstein, Millikan
- ▶ Onde de matière - de Broglie, Davisson & Germer

rayonnement électromagnétique
(onde) composé de quanta
(photon)



Longueur d'onde ?

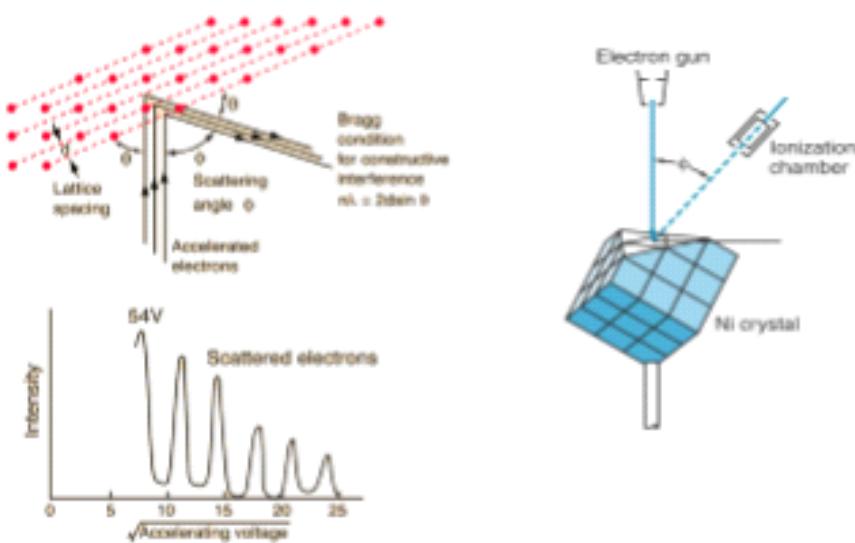
Hypothèse de de Broglie

pour les photons :

- ▶ énergie $E = \hbar\omega$
- ▶ impulsion $p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c}$ et $\omega = ck$
- ▶ donc $p = \hbar k = \frac{\hbar}{\lambda}$

Hypothèse de de Broglie : valable pour la matière !

Diffraction des électrons sur un cristal



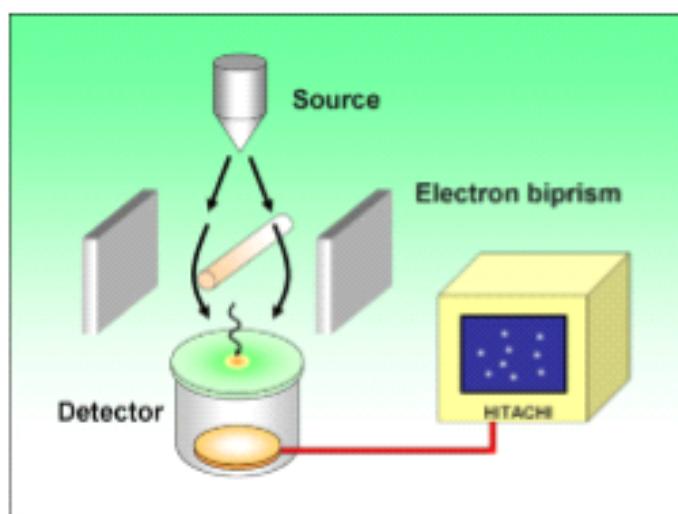
The Davisson-Germer experiment.

Low energy electrons scattered at angle ϕ from a nickel crystal are detected in an ionization chamber. The kinetic energy of electrons could be varied by changing the accelerating voltage on the electron gun.

En 1927, Clinton Davisson et Lester Germer ont bombardé une cible de nickel cristallin par des électrons lents de 54 électron-volts, soit une vitesse de 4 000 km/s. La dépendance angulaire de l'intensité électronique réfléchie a été mesurée, et sa figure de diffraction a été identifiée comme identique à celle prédictive par William Henry Bragg et William Lawrence Bragg pour les rayons X.

Interférences avec des électrons

A. Tonomura et son équipe Hitachi Research Laboratory (1989)



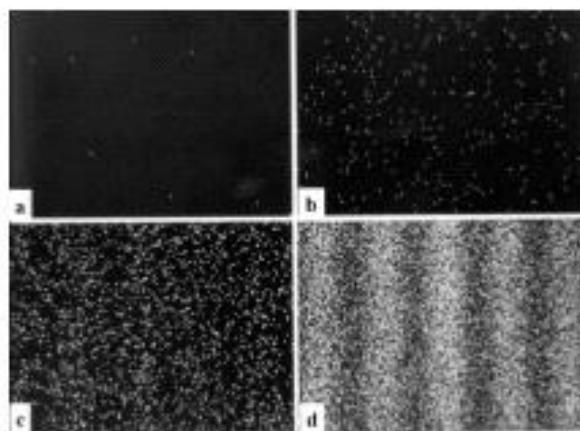
Electrons emitted from a source are sent to the electron biprism. The electrons are attracted towards the central filament and overlap in the electrons arrived lower detector plane at the detector are displayed as bright spots on the monitor. Even when the electron arrival rate is as low as 10 electrons/sec, the accumulation of single electrons forms a biprism interference pattern.

Interférences avec des électrons



Single electron events build up to form an interference pattern in the double-slit experiments.

Interférences avec des électrons



(a) 8 (b) 270, (c) 2000, (d) 180.000 électrons

Single electron events build up to form an interference pattern in the double-slit experiments.

Double Nature Onde-particule

DUALITÉ ONDE-PARTICULE

Toutes les animations et explications sur
www.toutestquantique.fr

Chapitre 2: Approche ondulatoire de la mécanique quantique
 → obj: décrire le mouvement d'un particule (classiquement $\{\vec{r}, \vec{p}\}$) pas de dynamique intérieure.
 Description ondulatoire (cf. op d'inférence) $\rightarrow \psi(\vec{r}, t)$ Fonction d'onde. ~ 1930 Schrödinger.
 → ph de la mesure.

I. Interférence de matière

Exp. fente d'Young : Amplitude d'oscillation A_1, A_2 selon le chemin.

$$|A_1 + A_2|^2 = \text{Intensity}$$

$$\Rightarrow (\text{densité de}) \text{ probabilité de trouver corpus en } \vec{r}, t = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$$

II. Fonction d'onde et op de Schrödinger

1. Ph de trajetoire (fond d'espace des phases (\vec{r}, t))

Etat quantique d'une particule $\psi(\vec{r}, t)$
 → ph de $\Psi(\vec{r}, t)$ (interférence) défini à plus de près
 $|\Psi\rangle$ relatif à la densité de prob.

2. Mesure (classique) du objet quantique est "probabilité"
 $\int p = \lambda |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3x = \text{prob de trouver le particule dans volume } d^3x \text{ autour de } \vec{r}$

$$\text{Intégrale} \int_{\text{espace}} d^3x \lambda |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$$

3. Mesure: associé à 1 opérateur A qui agit sur $\Psi(\vec{r}, t)$

- valeur possible de la mesure A : valeur propre λ (ici λ apparaît non diagonal)
- Après la mesure: si on a effectué la mesure, système est dans l'état propre associé $\Psi_\lambda(\vec{r}, t)$
- $A \Psi_\lambda(\vec{r}, t) = \lambda \Psi_\lambda(\vec{r}, t)$

• décomposition spectrale:
 toute fct d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ peut s'écrire

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n(t) \Psi_n(\vec{r})$$

↳ Hypothèse: Ψ_n égale à une fonction d'onde.

Mesure A donner résultat λ_n avec la probabilité

$$\frac{|c_n|^2}{\sum_n |c_n|^2} \quad \text{distance à la valeur propre} = (\text{valeur du produit scalaire } \int \Psi^* \Psi)$$

Rq: grand associé à l'interaction objet quantique vs apparaît classique.

4. Dynamique de la fct d'onde: op de Schrödinger particule de masse m dans potentiel $V(\vec{r})$ oblit

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla_x^2 + \nabla_y^2 + \nabla_z^2 \right) + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t)$$

• si: $V(\vec{r}) = 0$, solution $\Psi(\vec{r}, t) \sim A e^{i(Et - \vec{p}\vec{r})}$ (généralité que tout plane? qd invariance par translation d'où les ondes périodiques)

(onde plane vs inv translation)
 avec $w = \frac{\hbar k}{2m}$
 $E = \hbar w = \frac{(kR)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$ = relation de dispersion des particules dans le vide.

Énergie associée $E = \hbar w = \frac{(kR)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$ = relation de dispersion des particules dans le vide.

Solution de quantité de mouvement bien déterminée

→ mesure de quantité de mouvement $P \Psi(\vec{r}, t) = \hbar k \Psi(\vec{r}, t)$

• si particule est dans 1 bâti de taille L de dimension 1 $\frac{L}{\Delta x} \rightarrow$

Nombre de N: $\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3x = |A|^2 L$
 $\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{L}}$

→ densité probabilité de trouver particule en $x = \frac{1}{L} = |\Psi(x, t)|^2$
 → particule délocalisée dans le bâti après N mesures de position $\Rightarrow \{x_i\}_{i=1, \dots, N}$ avec $x_i = 0$ et $\Delta x = L$

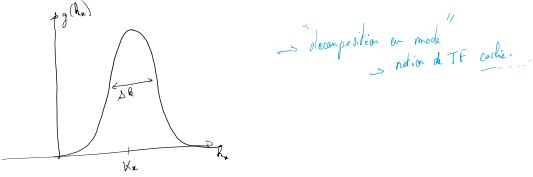
• Ce principe $\Rightarrow \Psi(x_1, t_1) = \Psi(x_2) \Rightarrow \hbar k = n \frac{2\pi}{L} \frac{\hbar}{\Delta x} = n \frac{\hbar}{\Delta x} \Rightarrow \Delta p = \frac{\hbar}{\Delta x}$

→ $\Delta x \Delta p = \hbar$ (Heisenberg).

• ici les ondes planes sont associées à une position

• on peut décrire 1 particule avec "1 partie"
 \rightarrow papot d'onde $\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int g(\vec{k}) \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(\vec{k})t)) d^3k$ avec $\int d^3k |g(\vec{k})|^2 = 1$

↳ Hypothèse de la mesure via thermodynamique/énergie
 → mesure = système macro au contact d'un micro \rightarrow mesure à l'échelle \rightarrow devient macro
 → mesure = système macro au contact d'un micro \rightarrow système décrivé par entropie/énergie
 → quel frontière macro/micro? Système décrivé par entropie/énergie
 → on cherche à extrémiser les deux en même temps
 sans réussir, l'un gagne sur l'autre \rightarrow micro gagne / macro gagne



→ "décomposition en mode"
→ notion de TF complexe...

Vitesse de groupe: $\omega_0 = \frac{dk}{dt} \Big|_{k=0} = \frac{k_0 \omega}{m} = \frac{\omega}{m}$ ($k_0 \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$)

$\frac{dk}{dt}$ est constant au niveau individuel
peut être
varie à long cours avec une vitesse individuelle

Relation de dispersion quadratique → élargissement du paquet d'onde → temps d'évolution "court"
linéaire (au plan) → pas d'élargissement → paquet "stable"

Inertielles de Heisenberg:

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

$$m \delta g, \quad \Delta x^0 \sim 10^{-3} \quad \left\{ \begin{array}{l} \Delta x \delta p \sim 10^{-3} > \hbar \\ \Delta p \sim 10^{-3} \text{ a.s.} \end{array} \right.$$

Paquet d'onde: $\Psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k g(k) \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(k)t))$

• changement d'origine: $\langle \vec{x} \rangle = \vec{x} \quad (\text{et } \vec{p})$

$$\begin{aligned} \hat{p}^x(\vec{x}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k g(k) \hbar k^x \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(k)t)) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k g(k) (-i\hbar \vec{k}_x) \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(k)t)) \\ &= (-i\hbar \vec{k}_x) \Psi(\vec{x}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{x} \Psi(\vec{x}) &= \vec{x} \Psi(\vec{x}) \\ \rightarrow \langle \hat{p} \rangle_x &= \langle \Psi | \hat{p} | \Psi \rangle = \int d^3x \Psi^*(\vec{x}) \underbrace{\int d^3k}_{\vec{k}} g(k) \Psi(\vec{x}) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x \int d^3k g^*(k) \hbar k^x g(k) \exp(-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(k)t)) \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega(k)t)) \rightarrow \int d^3x \text{ donc } \delta(\vec{k} - \vec{k}') \\ &\approx \int d^3x \hbar k^x \underbrace{\int d^3k |g(k)|^2}_{\text{distributif du paquet d'onde}} \end{aligned}$$

$$(\Delta x)^2 = \langle \vec{x}^2 \rangle - \langle \vec{x} \rangle^2$$

$$= \langle \vec{x}^2 \rangle = \int d^3x \lambda^3 |\Psi(\vec{x}, t)|^2$$

$$(\Delta p)^2 = \langle \vec{p}^2 \rangle - \langle \vec{p} \rangle^2 = \langle \vec{p}^2 \rangle = \hbar^2 \int d^3x |\vec{k} \Psi(\vec{x})|^2$$

Candy-Schurz:

$$\left| \int d^3x f^*(\vec{x}) g(\vec{x}) \right|^2 \leq \left| \int d^3x f(\vec{x}) \int d^3x g^*(\vec{x}) \right|^2$$

$\overbrace{\vec{x} \Psi^*(\vec{x})}^{\text{f}} \overbrace{\vec{k} \Psi(\vec{x})}^{\text{g}}$

$$\rightarrow \frac{1}{\hbar^2} \Delta_x^2 \Delta_p^2 \geq \left| \int d^3x (\vec{x} \Psi^*) (\vec{k} \Psi) \right|^2$$

par IPP

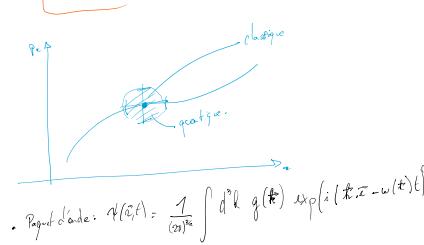
$$\begin{aligned} I &= \int d^3x (\vec{x} \Psi^*) (\vec{k} \Psi) \\ &\approx - \int d^3x \vec{x} \Psi^* - \int d^3x \vec{x} (\vec{k} \Psi^*) \Psi \\ &= -1 - I^* \quad \Rightarrow I + I^* = -1 = 2 \operatorname{Re}(I) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\hbar^2} \Delta_x^2 \Delta_p^2 \geq \frac{1}{4} \quad (\text{car } |I| \geq \operatorname{Re}(I))$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}} \quad \leftarrow \text{vient de def du paquet d'onde + prop de TF.}$$

9.4 Chapitre

$\Rightarrow \left| \sin \delta_p \geq \frac{1}{2} \right| \Leftarrow$ vaste de deff du groupe + Γ



• Prop d'onde: $\psi(\vec{x},t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int dk g(k) \exp(i(kx - w(k)t))$

• Vitesse de groupe: $g(k)$ contient alors de la info avec rapport k) DR abo I (dans si il part) vitesse de dispersion
vitesse $v_g(t)$ → forme sinusoïdale à l'origine → forme sinusoïdale à l'origine

$w(k) = w(k_0) + \tilde{w}_g(k, k_0) + \dots$

$\psi(\vec{x},t) = \exp(i(k_0 x - w(k_0)t)) \psi(\vec{x}, w_g t, t_0) \rightarrow$ on décrit le paquet d'onde comme une translation en t + une phase

$$\Rightarrow \tilde{w}_g = \frac{dw}{dk} \Big|_{k_0}$$

• Particule libre: $t_0 w = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \tilde{w}_g(k_0) = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{\vec{k}_0^2}{m}$

• Résultat exact pour particule libre (obtenu en utilisant les éqs de Green)

$$\psi(\vec{x},t) = \int d^3\vec{c}' U(\vec{x},t; \vec{c}',t) \psi(\vec{c}',t)$$

$$\text{avec } U = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2(t-t')} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{i m (\vec{c} \cdot \vec{c}')^2}{2\hbar^2(t-t')} \right) \rightarrow \underline{\text{élargissement du paquet d'onde}}$$

Carré de probabilité :

Densité de probabilité $|\psi(\vec{x},t)|^2$ signif. $\int d^3x |\psi(x,t)|^2 = 1$ → conserve donc la conservation de prob.

→ variation local de $|\psi(\vec{x},t)|^2$ associé à densité de carré de prob.

Eqs de Schrödinger (on obtient pour la partie des ondes aussi valable à telles équations).

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{x},t) + V(\vec{x},t) \psi(\vec{x},t)$$

$$* \quad i\hbar \partial_t \psi^*(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\vec{x},t) + V(\vec{x},t) \psi^*(\vec{x},t)$$

$$\partial_t |\psi(\vec{x},t)|^2 = \psi^*(\vec{x},t) \partial_t \psi(\vec{x},t) + (\partial_t \psi^*(\vec{x},t)) \psi(\vec{x},t)$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi) + \frac{1}{2m} \nabla \psi^* \psi - \frac{i\hbar}{2m} \psi (\nabla^2 \psi^*) - \frac{1}{2m} \nabla \psi^* \psi$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*)$$

$$= -\nabla^2 \tilde{\psi}(\vec{x},t) \quad \text{avec } \tilde{\psi}(\vec{x},t) = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*)$$

$$\Rightarrow \tilde{\psi}(\vec{x},t) = \frac{1}{m} R_t (\psi^*(\vec{x},t) - \psi(\vec{x},t)) \quad (\text{donnée de vitesse})$$

$$\text{avec } [\nabla^2 | \psi(\vec{x},t) |^2 + \nabla \cdot \tilde{\psi}(\vec{x},t)] = 0$$

II Applications de l'équation ondulatoire

1. Potentiel $V(\vec{r})$ indép du temps

autre solution stationnaire $\psi(\vec{x},t) = \phi(\vec{x}) \chi(t)$

$$i\hbar \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\vec{r}) \psi$$

$$\begin{aligned} & \Rightarrow i\hbar \frac{1}{\phi(\vec{r})} \partial_t \chi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\phi(\vec{r})} \nabla^2 \phi(\vec{r}) + V(\vec{r}) = E = \hbar \omega \\ & \Rightarrow \chi(\vec{r}) = A \exp(-i\omega t) = \exp\left(-\frac{i\hbar}{\hbar} \vec{k} \cdot \vec{r}\right) \end{aligned}$$

$$\text{et } \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + V(\vec{r}) \phi(\vec{r}) \right) = E \phi(\vec{r}) \rightarrow \text{on écrit } E \text{ est paquet } \phi(\vec{r}) \text{ de l'opérateur } \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) = \hat{H} \text{ Hamiltonien}$$

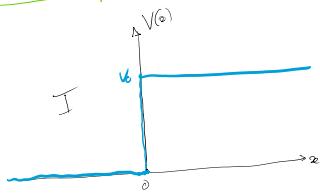
$$\text{Rappel: } V(\vec{r}) = 0, \quad \hat{H}\left(\frac{1}{\hbar} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}\right) = E \left(\frac{1}{\hbar} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}\right) \quad \text{avec } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}^2 \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}\right)^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}\right)$$

Avec $V(\vec{r}) = V_0 = \text{const}$ → états propres mais $E(\vec{r}) \rightarrow E(\vec{r}) + V_0$.

2. Marche de potentiel

$$\Delta V(\vec{r})$$

2. Marche de potentiel



éq. de Schrödinger qui évolue en x: $-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi(x) + (V(x) - E) \psi(x) = 0$

$$\left. \begin{aligned} \partial_x \psi(x) &\xrightarrow{\text{continuité en } 0} 0 \\ \Rightarrow \psi(\varepsilon) &\xrightarrow{x \rightarrow 0} \psi(-\varepsilon) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \psi(\varepsilon) \xrightarrow{x \rightarrow 0} \psi(-\varepsilon)$$

si V fini constant

dans région I: $\psi_I(x) = A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x}$
 $k_I > 0$ avec $k_I > 0$ et $E = \frac{\hbar^2 k_I^2}{2m}$, $k_I = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

dans région II: $\psi_{II}(x) = A_{II} e^{ik_{II} x} + B_{II} e^{-ik_{II} x}$
avec $E = V_0 + \frac{\hbar^2 k_{II}^2}{2m} \Rightarrow k_{II} = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$ si $E > V_0$ ($\geq \frac{\hbar^2 k_I^2}{2m}$)

si $E < V_0$: $\psi_{II}(x) = A_{II} e^{ik_{II} x} + B_{II} e^{ik_{II} x}$

$$E = \underbrace{V_0}_{\approx} + \underbrace{\frac{\hbar^2 k_I^2}{2m}}_{\approx} \quad k_I = \underbrace{ik_I}_{\approx} \quad V_0 - \frac{\hbar^2 k_I^2}{2m}$$

$A_I \neq 0$ "par normalisation"

↳ 2 ondes planes perpendiculaires anyway

→ ondes planes comme superposition d'un projet d'onde incident

$A_I e^{ik_I x} \rightarrow$ composante de $\psi_I = \frac{k_I}{r} e^{ik_I r}$

$B_I e^{ik_I x} \rightarrow$ " incident" après $x > 0$

superposition

de 2 solutions

avec C.F.

→ dans II à $E > V_0$: $k_{II} \rightarrow$ "transmise"
 $B_{II} \rightarrow$ "incident" après $x > 0$

→ 2 types d'onde d'onde incident:

balise en $x=+\infty$ à $t=0$, $B_I \neq 0$
ou en $x=-\infty$ à $t=0$, $A_I \neq 0$

→ renvoie à 1 problème de diffusion: onde incident
→ 1 équation

$E > V_0$: activité de ψ en 0: $A_I + B_I = B_S$
de $Q \neq 0$: $i k_I (A_I - B_I) = i k_S B_S$

$$\Rightarrow \begin{cases} 1 + \frac{B_S}{B_I} = \frac{A_I}{B_I} \\ 1 - \frac{B_S}{B_I} = \frac{A_I}{B_I} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{A_I}{B_I} = \frac{2k_I}{k_S + k_I} \\ \frac{B_S}{B_I} = \frac{k_I - k_S}{k_S + k_I} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \text{coefficient de réflexion: } R = \frac{B_S}{B_{\text{incident}}} = \frac{|B_S|^2}{|A_I|^2} = \frac{k_S^2}{(k_I + k_S)^2}$$

$$= \left(\frac{k_S - k_I}{k_S + k_I} \right)^2 = 1 - \frac{4k_I k_S}{(k_I + k_S)^2} = 1 - T$$

$$\text{Coefficient de transmission: } T = \frac{B_S}{B_{\text{incident}}} = \frac{|B_S|^2 / k_S}{|A_I|^2 / k_I} = \frac{k_I k_S}{(k_I + k_S)^2}$$

$$T \rightarrow 1 \quad \text{si } k_S \approx k_I \quad \Rightarrow |V_0| \ll E$$

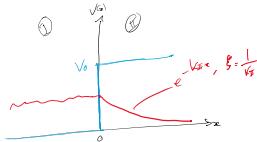
Condition d'incident : $E_0 > V_0$ ($E > V_0$)

$$T \rightarrow 1 \quad \text{et} \quad k_s \sim k_0 \quad \Rightarrow \quad |V_0| \ll E \quad (\text{et } k_0 \ll k)$$

$\Rightarrow E \approx V_0$, $T \approx 0$

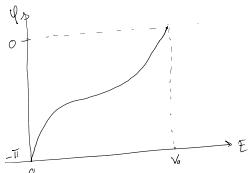
Si $E < V_0$: $\psi(x) = A_2 e^{-k_0 x}$
 ($k_0 \rightarrow i k_0$ par rapport à avant).

$$\Rightarrow \frac{A_1}{A_2} = \frac{C k_0}{k_0 + i k_0} / \frac{B_2}{A_2} = \frac{k_0 - i k_0}{k_0 + i k_0} \approx e^{-i k_0 x}$$



$$R = \left| \frac{B_2}{A_2} \right|^2 = 1$$

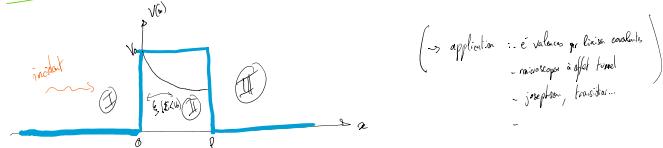
avec $\Psi = \arctan \left(\frac{-2 k_0 V_0}{k_0^2 - k_0^2} \right)$



$$\begin{cases} E > V_0 \rightarrow \text{onde plane} \\ E < V_0 \rightarrow \text{onde enroulée} \\ E < V_0 \rightarrow \text{onde enroulée} \\ V_0 \rightarrow \text{pas de} \end{cases}$$

\Rightarrow effet tunnel : densité de probabilité dans région interdite.

3) Barrière de potentiel - Effet Tunnel



(\rightarrow application : émission par laser conducteur
 - microscopie à effet tunnel
 - spectroscopie, transition...)

Si $k_0 l \ll 1$ \Rightarrow effet tunnel \rightarrow onde incidente $T \approx e^{-i k_0 l}$

$$\textcircled{1} \quad A_1 = e^{-i k_0 l}, \quad k_0 = \frac{2 \pi E}{\hbar}$$

$$\textcircled{2} \quad A_2 = e^{-i k_0 l}, \quad k_0 = \sqrt{\frac{2 m (V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$\textcircled{3} \quad k = B_2 = i k_0$$

• condition en Ψ et Ψ' au O et l

$$\beta = \frac{A_1 k_0 e^{i k_0 l}}{(k_0 l)^2 e^{i k_0 l} - (k_0 l)^2 e^{-i k_0 l}}$$

$$\rightarrow \text{Transmission à travers la barrière : } T = \frac{dt}{dx} = \frac{l |\beta|^2}{l |\Psi_0|^2} = |\beta|^2$$

$$\propto \xi = \frac{l}{k} \ll 1$$

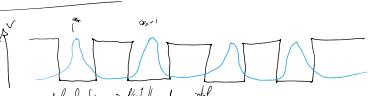
$$\Rightarrow T \approx \frac{16 \pi^2 k^2}{(l + \delta)^2} \exp\left(\frac{2 l}{\delta}\right)$$

Application : microscopie à effet tunnel :
 \rightarrow précision en l de 0,01 nm.

• liaison complète

$$\rightarrow \text{diffraction en effet tunnel de l'électrostatique} \rightarrow E_{ext} \approx \frac{q^2}{4 \pi \epsilon_0 l} \rightarrow \delta \text{ décalage} \rightarrow l \rightarrow E \rightarrow \text{liaison complète favorisée !!}$$

• \rightarrow dans un solide :



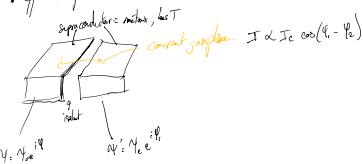
\rightarrow délocalisation à l'échelle du cristal

• effet Torsion (1973)

suppose deux molécules, les T sont couplées. $I \approx I_0 \cos(\theta - \theta_0)$

→ délocalisation à cause du courant

• effet Josephson [1973]

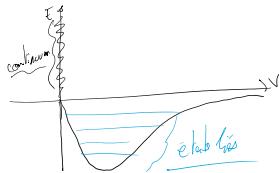


4) Maximum de potentiel - Etat fini

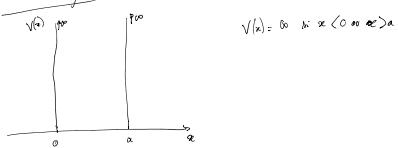
Réponse : énergie constante ($E = \frac{kT}{2m}$) → état stable → état d'onde plane.

$\rightarrow V(x)$ au minimum, état stable, état de minimum, état périodique.

\rightarrow Énergie discrète



• Point infini :



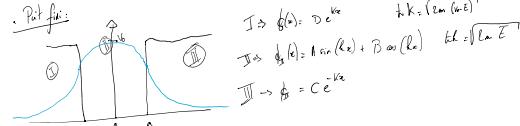
$$\frac{-\hbar^2}{2m} \phi''(x) + V(x) = 0 \Rightarrow A e^{ikx} + B e^{-ikx} \text{ avec } \phi'(0) = 0 \text{ avec } E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}.$$

$$\rightarrow \phi(x) = A \sin(kx)$$

Δ $\phi'(0)$ discrète en 0 ou R.

$$\phi(0) = 0 \Rightarrow k = n\frac{\pi}{a} \text{ avec } n \geq 1$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad \text{discrète.}$$



$$\begin{aligned} & \text{et } \phi' \text{ continu en } x=0 \\ & \left. \begin{aligned} A \sin(kx) + B \cos(kx) &= C e^{-Vx} \\ -A \sin(kx) + B \cos(kx) &= D e^{-Vx} \end{aligned} \right\} \text{ avec } k = \sqrt{\frac{2m(E)}{\hbar^2}} \\ & \left. \begin{aligned} & \text{et } A \sin(kx) + B \cos(kx) = K D e^{-Vx} \\ & B \cos(kx) = K D e^{-Vx} \end{aligned} \right\} \text{ avec } K = \sqrt{\frac{C+D}{2}} e^{-Vx} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & A \sin(kx) = \frac{C-D}{2} e^{-Vx} \\ & B \cos(kx) = \frac{C+D}{2} e^{-Vx} \end{aligned}$$

Autre éq. diff. abs : $\begin{cases} k \sin(kx) = -K \\ k \tan(kx) = -K \end{cases} \Rightarrow k \tan(kx) = \pm k \cot(kx) \Rightarrow \text{impossible!}$

$$\Rightarrow \text{ansatz} \quad A = 0, B \neq 0 \quad (k_x) \tan(k_x) = K_x, \text{ solutions paires } \phi(x) = \phi(x)$$

$$\text{ou } B = 0, A \neq 0 \quad (k_x) \cot(k_x) = K_x, \text{ solutions impaires}$$

$$\text{ou } C = D$$

$$\Rightarrow J = \text{constante}, \quad (I\psi)(x) = \psi(x)$$

$$\begin{aligned} & \text{Symétrie du problème: une } -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \text{ invariant par } J \\ & \psi(x) \rightarrow \psi(-x) \end{aligned}$$

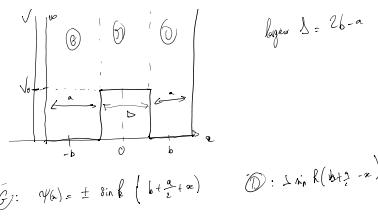
Et de Schrödinger : $H(\psi) = E(\psi)$

$$\begin{aligned} & \text{Si } H \text{ et } J \text{ commutent} \Leftrightarrow H(I\psi) = I H(\psi) = I E(\psi) \\ & \downarrow \\ & H(\psi) = E(\psi) \end{aligned}$$

$\Rightarrow H \text{ et } J \text{ peuvent être diagonalisés en même temps!}$

Un peu plus de J : $J(\psi(x)) = \psi(-x) = J(\psi)$

$$J^2 \psi = J(J\psi) = J^2 \psi \Rightarrow J^2 = J^2$$



$$\log \Delta = 2b/a$$

$$(6): \psi_{kl}(x, y) \propto \sin k_x x \sin k_y y \quad (7): \sin k_x x \sin k_y y$$

$$(8): N(k) = \frac{\cosh(Ka)}{\sinh(Ka)} \text{ si pair}$$

$$= \frac{\tanh(Ka)}{\sinh(Ka)} \text{ si impair}$$

caractéristique de $k_x k_y a \approx (b/a)$

$$\tan(k_x) = -\frac{k}{K} \coth \frac{Ka}{2} \quad (\text{pair})$$

$$\tan(k_x) = -\frac{k}{K} \tanh \frac{Ka}{2} \quad (\text{impair})$$

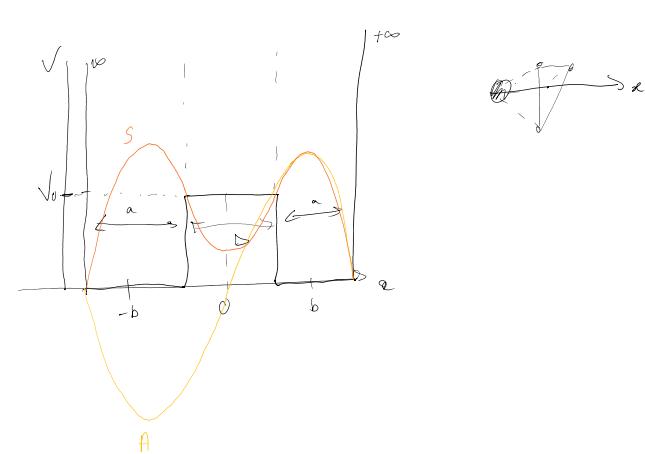
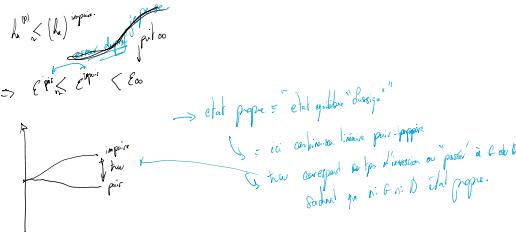
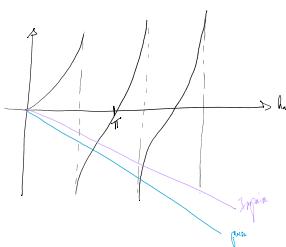
On regarde des angles très petits

$$ka = \sqrt{2E} \quad \Rightarrow K \approx \frac{1}{a} \sqrt{2E} \gg k \approx \frac{1}{a} \sqrt{2E}$$

$$\Rightarrow K \gg 1$$

$$\Rightarrow \tan(k_x) \approx \frac{ka + \frac{1}{2}k^2}{ka - \frac{1}{2}k^2} = \frac{1+e^{-ka}}{1-e^{-ka}} \approx 1+e^{-ka}$$

$$\Rightarrow \tan(k_x) \approx -\frac{k}{K} (1 \pm e^{-ka}) \quad \begin{matrix} + \\ - \end{matrix} \text{ pair}$$



$$\Rightarrow k_x \lesssim k_A \lesssim \frac{\pi}{2} \quad \text{pour } G \approx D \text{ profond.}$$

$$\tan(k_x) = -\frac{k}{K} \left(1 + \frac{2}{A} e^{-KA} \right)$$

$$E_{AIS} = \frac{\hbar^2 k_A^2}{2m}$$

$$\text{avec } \tan(k_x) \approx \frac{k_x - \frac{\pi}{2}}{k_A} \approx -\frac{\lambda_x(k_x)}{\frac{1}{K_A} (1 + e^{-KA})}$$

$$\Rightarrow k_{SA} \approx \frac{\pi}{a (1 + \lambda_{SA})}$$

$$\Rightarrow E'_0 = \frac{E_S + E_A}{2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left[\frac{1}{2} (1 + \lambda_S)^{-2} + \frac{1}{2} (1 + \lambda_A)^{-2} \right]$$

à condition que

$$\Rightarrow E_0' = \frac{E_S + E_A}{2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^2} \left[\frac{1}{2} (1+\lambda_S)^{-2} + \frac{1}{2} (1+\lambda_A)^{-2} \right]$$

$$\sim \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^2} \left[\frac{1}{2} - \lambda_S + \frac{1}{2} - \lambda_A \right]$$

$$\sim \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^2} \left(1 - \frac{2}{\lambda_A} \right) \quad \left(\text{qui correspond à un point de logique à } \frac{2\pi}{\lambda_A} \right)$$

$\Delta\omega = \epsilon_A - \epsilon_S \quad \epsilon_A' \xrightarrow{\text{perturbation}} \epsilon_A$ (lien physique à l'effet tunnel)

$$= \frac{\hbar^2 T^2}{2m^2} \left[(1+\lambda_A)^{-2} - (1+\lambda_S)^{-2} \right]$$

$$\sim \frac{\hbar^2 T^2}{m^2} \frac{4e^{-\frac{\lambda_A}{T}}}{\lambda_A}$$

Changement: nombre de N2 dans configuration G et D

Quantum: _____ avec 3+H échelons entre 2 configurations

on considère les états $N_B(\omega) = \frac{1}{\hbar\omega} (\alpha_S(\omega) - \alpha_A(\omega))$

$$\alpha_B(\omega) \sim \frac{1}{\hbar\omega} (\alpha_S(\omega) + \alpha_A(\omega))$$

Si $\omega \neq 0$, on considère 1 état $\alpha_P(\omega), \alpha_R(\omega)$

$$\Rightarrow \alpha_P(\omega, t=0) = \frac{1}{\hbar\omega} (\alpha_S(0) + \alpha_A(0))$$

$$\Rightarrow \alpha_P(\omega) = \frac{1}{\hbar\omega} \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar\omega} \epsilon_S t\right) \alpha_S(\omega) + \exp\left(-\frac{i}{\hbar\omega} \epsilon_A t\right) \alpha_A(\omega) \right]$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega} \exp\left(-\frac{i}{\hbar\omega} \epsilon_S t\right) \left(\alpha_S(\omega) + e^{i\omega t} \alpha_A(\omega) \right)$$

avec $\Delta\omega = \epsilon_A - \epsilon_S = \omega$ fréquence de Rabi

à la date $t = \frac{T}{\omega} = \frac{\pi\hbar}{2eV}$, $\alpha_P(t=0) = \alpha_B(\omega)$ → naturellement synchronisé?

• Par N2, $\omega = \frac{v}{\lambda} = 8.68 \text{ GHz}$, $T = 4.2 \cdot 10^{-5} \text{ s}$

$$\Rightarrow \langle \alpha_P(t) | \hat{H} | \alpha_P(t) \rangle = \frac{1}{2} \left(e^{\frac{i}{\hbar\omega} \epsilon_S t} \langle \alpha_P + e^{\frac{i}{\hbar\omega} \epsilon_S t} \langle \alpha_P | \left(e^{-i\omega t} \alpha_S | \alpha_S \rangle + e^{i\omega t} \alpha_A | \alpha_A \rangle \right) \right)$$

$$= \frac{1}{2} (\epsilon_A + \epsilon_S) = E_0'$$

• $\Delta\omega$: fixe par amplitude tunnel (fixe en $e^{-\lambda S}$)
→ sensible à l'épaisseur de puce, paramètre

NH3: $V_0 \sim 0.55 \text{ eV}$, $b \approx 0.8 \text{ Å} \Rightarrow \Delta\omega = 0.5 \cdot 10^8 \text{ Hz}$
NH3: $V_0 \sim 1.5 \text{ eV}$, $b \approx 0.8 \text{ Å} \Rightarrow \Delta\omega \sim 1.4 \cdot 10^8 \text{ Hz}$ ($\sim 2 \text{ GHz}$! (pas assez!).

• Rôle d'absorption à $\Delta\omega$: signature de la présence de NH3. → phénomène inverse si on prépare les molécules des NH3.



• Rôle application du double point

e^- entre 2 atomes, e^- dans le solide (au niveau chimique)

e^- entre 2 atomes, e^- dans le solide (au niveau chimique)

Énergie E_0 n'est pas due à alone H

$$\hookrightarrow K = \sqrt{\frac{2eV_0}{\hbar}} \Rightarrow \Delta\omega \sim E_0 e^{-\lambda S}$$

Solu: $\Delta\omega \text{ et } E_0$ $\left\{ \begin{array}{l} \Delta\omega \sim 1 \text{ eV}, T \sim 10^{-5} \text{ s} \\ E_0 \sim 4 \text{ eV} \end{array} \right.$ → décalage de e^- dans solide.

gas: $\Delta\omega \text{ et } E_0$ $\left\{ \begin{array}{l} \Delta\omega \sim 10^8 \text{ Hz} \\ E_0 \sim 4 \text{ eV} \end{array} \right.$ \gg temps Rabi aussi à un niveau de solide
→ petit effet pour e^- dans solide à solide

- Jusque là : on décrit la matière avec des fonctions d'onde
 - dévolution de l'équation de Schrödinger (éq. différentielle)
 - on a rencontré différents formalismes d'un même état :
 - $\psi(\vec{r}, t)$ fonction d'onde complexe avec $\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = 1$
 - espace muni d'un produit scalaire $\int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) d\vec{r}$
 - structure vectorielle : $a|\psi\rangle + b|\phi\rangle$ fonction d'onde
 - $a, b \in \mathbb{C}$
 - Formulation équivalente : $\Psi(\vec{r}, t)$: rapport du produit d'onde

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi_i^*(\vec{r}, t) \psi_i(\vec{r}, t) d\vec{r} = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r} \Psi_i^*(\vec{r}, t) \Psi_i(\vec{r}, t)$$

$$a\Psi(\vec{r}, t) + b\Psi(\vec{r}, t) \quad \text{Etat physique} \quad (\text{superposition } a|\psi_i\rangle + b|\phi_i\rangle)$$
 - Oscillateur harmonique : $\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n(t) \underbrace{|\psi_n(\vec{r})\rangle}_{\text{état propre de } H}$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

→ Plusieurs représentations d'un même état $|\psi\rangle \in$ espace de Hilbert

Historiquement : années 20, 2 théories quantiques concordantes

- Théorie ondulatoire (De Broglie, Schrödinger)
- Théorie matricielle (Heisenberg, Born, Pauli)

Schrödinger et Dirac

- 2 formulations d'une même théorie

- certaines degrés de liberté sans analogie classique
 - formulation de 1926 abstraite "matricielle" pour le spin
- Notations (de Dirac) : état $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_H$ espace de Hilbert
 - $\langle \psi | \psi \rangle$ projecteur sur état $|\psi\rangle$ ($|\psi\rangle \rightarrow \langle \psi | \psi \rangle \in \mathbb{C}$)

I. Postulat de la mécanique quantique

I. État d'un système décrit par un vecteur $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_H$
 muni d'un produit scalaire hermitien $\langle \psi_i | \psi_j \rangle^* = \langle \psi_i | \psi_j \rangle$
 \Rightarrow norme $\langle \psi | \psi \rangle = \|\psi\|^2$

II. Observables, décrites par un opérateur \hat{A} qui agit sur les vecteurs dans \mathcal{E}_H

- autoadjoint : $\hat{A}^* = \hat{A}$, $\langle \psi_i | \hat{A} \psi_j \rangle = \langle \hat{A} \psi_i | \psi_j \rangle$ ($= \langle \psi_i | A \psi_j \rangle^*$)
 (pour assurer que valeurs propres réelles
 et donc que résultat des mesures sont réels)

Si $|\psi\rangle$ état du système au moment de la mesure
 les seules valeurs possibles de la mesure sont les valeurs propres λ_a de \hat{A}

$$\hat{A} |\psi_a\rangle = \lambda_a |\psi_a\rangle$$

On trouve la valeur λ_a avec probabilité $P_a = |\langle \psi_a | \psi \rangle|^2$
 (uniquement si λ_a non dégénéré, i.e. associé à un unique vecteur propre $|\psi_a\rangle$)
 Sinon $P_{ab} = \langle \psi | \Pi_{ab} | \psi \rangle$
 \hookrightarrow projecteur sur sous-espace propre

$$\Pi_{ab} = \sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$$

Après la mesure : si résultat est $\lambda_a \rightarrow$ système dans l'état $|\psi_a\rangle$
 (si λ_a est non dégénéré, sinon $\Pi_{ab} |\psi\rangle$)

Après la mesure : si résultat est $\lambda_a \rightarrow$ système dans l'état $|n_a\rangle$
 (si λ_a est non dégénéré sinon $\Pi_{\lambda_a}|\psi\rangle$)

Décomposition spectrale d'un opérateur
 idée : élaborer états propres d'un opérateur comme base de E_n

Théorème spectral : - (en mécanique), il existe des bases dénombrables
 → ex: états de l'oscillateur harmonique.
 ensemble des vecteurs propres d'un opérateur auto-adjoint.
 $\hat{A} \rightarrow \{|n_a\rangle\}$ états propres } base de E_n

Δ opérateur position $\hat{x} \rightarrow$ états propres $\notin E_n$
 $\hat{p} \rightarrow \dots \notin E_n$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{p}_x = -i\hbar \partial_x \rightarrow |p_x\rangle = -i\hbar e^{ip_x \frac{x}{\hbar}} \text{ pas normalisable.} \\ \hat{x} \Psi_{k_0}(x) = k_0 \Psi_{k_0}(x) \quad \text{avec } \Psi_{k_0}(x) = B \delta(x-x_0) \text{ pas normalisable.} \end{array} \right.$$

→ on généralise le théorème spectral aux fonctions propres $\notin E_n$
 en ne considérant que les combinaisons linéaires (cl.) de vecteurs propres E_n

→ on considère les états $\int dx c(\lambda) |n_\lambda\rangle \in E_n$

$$\begin{aligned} c(\lambda)(z) &= \int d\lambda c(\lambda) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{p} \cdot \vec{z}\right) \text{ normalisable} \\ &= \int d^3x_0 \delta(x-x_0) c(\lambda) \end{aligned}$$

Δ → pas à payer pour E_n de dimension infini, par "base" non dénombrable

au sens de la NQ . \hat{x} auto-adjoint \rightarrow états propres $\{|x_0\rangle\}_{x \in \mathbb{R}}$
 $\rightarrow |\psi\rangle = \int d^3x_0 \langle x_0 | \psi \rangle |x_0\rangle \quad \text{avec } \langle x_0 | \psi \rangle \equiv \psi(x_0)$

$$\begin{aligned} \hat{p} \text{ auto-adjoint} &\rightarrow \text{états propres } \{|\vec{p}\rangle\}_{\vec{p} \in \mathbb{R}^3} \\ \text{avec } |\psi\rangle &= \int d^3\vec{p} \langle \vec{p} | \psi \rangle |\vec{p}\rangle \\ \text{avec } \langle \vec{p} | \psi \rangle &\equiv e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{z}} \end{aligned}$$

III. Dynamique d'un système: éq de Schrödinger

$$i\hbar D_t H|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle \quad (\text{observable "énergie"})$$

Si \hat{H} diagonalisable $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$
 alors $|\psi_{(t=0)}\rangle = \sum_n \lambda_n |\psi_n\rangle$ $\stackrel{\lambda_n}{\underset{E_n}{\approx}}$

$$i\hbar D_t H|\psi\rangle = \sum_n i\hbar D_t (\lambda_n |\psi_n\rangle) = \sum_n \underbrace{E_n \lambda_n |\psi_n\rangle}_{\lambda_n \hat{H}|\psi_n\rangle}$$

$\{|\psi_n\rangle\}_n$ base $\Rightarrow \langle n_i | \psi_n \rangle = 0 \quad \forall i \neq n$

$$\begin{aligned} \Rightarrow i\hbar D_t \lambda_n(t) &= \lambda_n E_n \\ \Rightarrow \lambda_n(t) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \lambda_n(t=0) \\ \Rightarrow |\psi(t)\rangle &= \sum_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \lambda_n(t=0) |\psi_n\rangle \\ &= \left(\sum_n |\psi_n\rangle = \lambda_0 |\psi_0\rangle + \lambda_1 |\psi_1\rangle \right) \end{aligned}$$

Comment définir \hat{H} ?

→ par quantification du Hamiltonien classique.

Cf mécanique classique Hamiltonienne
 variable position q_a satisfait une équation de mouvement
 "impostion pa"

$$\frac{d\hat{q}_a}{dt} = \{q_a, H\}$$

$$\frac{d\hat{p}_a}{dt} = \{p_a, H\}$$

où $\{, \}$ est crochét de Poisson

$$\{F, G\} = \left\{ \left(\frac{\partial F}{\partial q_a} \frac{\partial G}{\partial p_a} - \frac{\partial G}{\partial q_a} \frac{\partial F}{\partial p_a} \right) \right\} = \hat{F}(\hat{q}, \hat{p}), \hat{G}(\hat{q}, \hat{p})$$

H classique \rightarrow \hat{H} quantique en remplaçant $\vec{q} \rightarrow \hat{q}$
 $\vec{p} \rightarrow \hat{p}$

Passage de la mécanique classique à la quantique

en méca classique : description hamiltonienne

$F(\vec{q}, \vec{p}) \rightarrow$ crochét de Poisson $\{F, G\}$
 espace des états

$$\{F, G\} = \left(\frac{\partial F}{\partial q_a} \frac{\partial G}{\partial p_a} - \frac{\partial G}{\partial q_a} \frac{\partial F}{\partial p_a} \right)$$

par exemple $\{x_a, p_b\} = \{p_a, p_b\} = 0$

$$\{x_a, p_b\} = \delta_{ab}$$

$$\frac{dx_a}{dt} = \{x_a, H\} \quad \text{ou } H(\vec{x}, \vec{p})$$

$$\frac{dp_a}{dt} = \{p_a, H\}$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$\Rightarrow \frac{dx_a}{dt} = \{x_a, H\} = \underbrace{\left(\frac{\partial p_a}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial p_a} - \frac{\partial p_a}{\partial x_a} \frac{\partial H}{\partial x_a} \right)}_{=0} = \frac{\partial H}{\partial x_a} = \frac{p_a}{m}$$

$$\frac{dp_a}{dt} = \{p_a, H\} = -\partial_x H = -\partial_x V$$

De même généralement : $\frac{dF(\vec{q}, \vec{p})}{dt} = \{F, H\}$ bien entre le formalisme et celui de Heisenberg.

Méca classique	\rightarrow	Nœud Q
espace des états \vec{q}, \vec{p}		espace de Hilbert
observables $F(\vec{q}, \vec{p})$		\hat{F} qui agit sur HS
$\{F, G\}$	$\frac{d}{dt} [\hat{F}, \hat{G}] \Rightarrow$	$[\hat{x}_a, \hat{p}_b] = [\hat{p}_a, \hat{x}_b] = i\hbar \delta_{ab}$

$$\Rightarrow \frac{d(\hat{x}_a)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{x}] \rangle \quad (\text{Théorème d'Ehrenfest})$$

$$\text{En effet } \frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \left(\frac{d}{dt} \langle \psi | \right) \hat{x} |\psi\rangle + \langle \psi | \partial_t \hat{x} |\psi \rangle + \langle \psi | \hat{x} \left(\frac{d}{dt} |\psi\rangle \right) \underset{i\hbar}{=} \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | \hat{p} |\psi \rangle \quad (\text{schrod})$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | [\hat{p}, \hat{x}] |\psi \rangle + \langle \psi | \partial_x \hat{x} |\psi \rangle \quad \text{Où A rappelle indigo du temps}$$

Consequence : $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$ conserve

$\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle$ — par une particule libre

$\langle \psi | L_C | \psi \rangle$ — potentiel central $V(\vec{r})$

→ identification des constantes du mouvement

• Si grandeur conservée $\Leftrightarrow [\hat{A}, \hat{H}] = 0$
 \Rightarrow diagonalisation simultanée de \hat{A} et \hat{H}

→ état propre $|\psi_k\rangle$ tel que $\hat{H}|\psi_k\rangle = E_k|\psi_k\rangle$
 $A|\psi_k\rangle = a_k|\psi_k\rangle$

→ caractérisation d'un état par ensemble de vecteurs propres (E, a_k)
 avec $[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{B}, \hat{B}] = 0$

\hookrightarrow ensemble complet d'observables qui commutent

• Vecteurs canoniquement conjugués $\{x_a, p_b\} = i\hbar$

• Variables canoniquement conjuguées $\{x_a, p_b\} = i\hbar$

$$\Rightarrow [x_a, p_b] \neq 0$$

\Rightarrow incertitude sur la somme de \hat{x}_a et \hat{p}_b

• conditions \hat{A}' et \hat{B}' tel que $[\hat{A}', \hat{B}'] \neq 0$

$$\Rightarrow \text{on considère } A \text{ et } B \text{ tel que, } \hat{A} = A - \langle A | B' | 0 \rangle \hat{B}$$

$$B = B' - \langle A' | B | 0 \rangle \hat{A}$$

\hat{A} et \hat{B} tel que $\langle A | \hat{A} | 0 \rangle = \langle A | \hat{B} | 0 \rangle = 0$

$$\| (\hat{A} + i\lambda \hat{B}) | 0 \rangle \| \geq 0$$

But: minima $\langle A | B' | 0 \rangle \langle A' | B | 0 \rangle$

$$\Rightarrow \langle A | \hat{A} - i\lambda \hat{B} | 0 \rangle \langle A' | \hat{B} + i\lambda \hat{A} | 0 \rangle$$

$$= \langle A | A' | 0 \rangle + i\lambda \langle A | B' | 0 \rangle + i\lambda \langle A' | B | 0 \rangle \geq 0 \quad \text{générant l'incertitude}$$

$$\Rightarrow \langle A | A' | 0 \rangle^2 - 4 \langle A | B' | 0 \rangle \langle A' | B | 0 \rangle \leq 0 \quad \text{dément}$$

$$\Rightarrow \Delta_a \Delta_{a'} \geq \frac{1}{2} |\langle A | [A, B] | 0 \rangle| \quad (\text{Règle d'incertitude d'Heisenberg})$$

$$\Delta_a^2 = \frac{1}{\pi} \sqrt{\langle A^2 | 0 \rangle} \sqrt{\langle A'^2 | 0 \rangle}$$

$$\Delta_a^2 = \left(\langle A | A' | 0 \rangle - \langle A | B' | 0 \rangle \right)^2$$

II. Oscillateur harmonique

meilleur classique: $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

$$\text{meilleur quantique: } \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \quad \text{avec } [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{E}{m\omega}} \Rightarrow \hat{X} = \frac{\hat{x}}{i} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} \quad \left. \begin{array}{l} [\hat{X}, \hat{p}] = i \\ \hat{P} = \frac{\hbar}{i} \hat{p} \end{array} \right\}$$

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega (\hat{x}^2 + \hat{p}^2)$$

$$\text{On introduit } \hat{a} = \frac{1}{\hbar\omega} (\hat{x} + i\hat{p})$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\hbar\omega} (\hat{x} - i\hat{p})$$

$$\Rightarrow [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{\hbar\omega} [\hat{x} + i\hat{p}, \hat{x} - i\hat{p}] = -\frac{i}{\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] + \frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] = 1$$

On cherche à déterminer a , a^\dagger à \hat{H}

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{2} (\hat{x} + i\hat{p})(\hat{x} - i\hat{p}) = \frac{1}{2} (\hat{x}^2 + \hat{p}^2) + \underbrace{\frac{1}{2} [\hat{x}, \hat{p}]}_{=0}$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \hbar \omega (a^\dagger a + \frac{1}{2})$$

\Rightarrow on peut diagonaliser \hat{H} et $\hat{N} = a^\dagger a$ simultanément

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

$$\langle n | \hat{N} | n \rangle = n = \langle n | a^\dagger a | n \rangle = \|a|n\rangle\|^2 \geq 0 \Rightarrow n \geq 0$$

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = \underbrace{a^\dagger a}_{=0} a - a a^\dagger a = -a$$

$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger a^\dagger - a^\dagger a^\dagger a = a^\dagger$$

$$[N, a^\dagger] = -a^\dagger \Rightarrow \hat{N} \in \hat{a} \hat{N} - \hat{a} \hat{N}$$

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \Rightarrow N(\hat{n}|n\rangle) = \hat{n} \underbrace{\hat{N}|n\rangle}_{n|n\rangle} - \hat{a}|n\rangle$$

$$= (n-1)(n|n\rangle)$$

$$\Rightarrow a|n\rangle \propto |n-1\rangle$$

$$[a, a^\dagger] = a^\dagger \Rightarrow N a^\dagger |n\rangle = a^\dagger n |n\rangle + a^\dagger |n+1\rangle = (n+1)a^\dagger |n+1\rangle$$

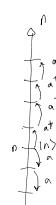
$$\Rightarrow a^\dagger |n\rangle \propto |n+1\rangle$$

$$|\langle a^\dagger | n \rangle|^2 = \langle a | a^\dagger | n \rangle = n \underbrace{\langle n | n \rangle}_{=1} = n$$

$$\Rightarrow a|n\rangle \propto |n\rangle$$

$$|\langle a^\dagger | n \rangle|^2 = n+1$$

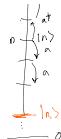
$$\Rightarrow a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$



$$\Rightarrow |\alpha|n\rangle = n^{-\infty}$$

$$|\alpha^+|n\rangle|^2 = n!$$

$$\Rightarrow |\alpha^+|n\rangle = \sqrt{n!} |n\rangle$$



On définit $|n\rangle$ étant le + petit état propre de \hat{N}

$$\Rightarrow |\alpha|n\rangle = \sqrt{n!} \underbrace{|n-1\rangle}_{\text{est état pur}}$$

$$\Rightarrow n_0 = 0 \text{ et } \alpha|0\rangle = 0 \quad \text{Où l'opérateur est vide.}$$

$$\Rightarrow |0\rangle \text{ est tel que } \alpha|0\rangle = 0$$

À partir de $|0\rangle$, on obtient $|1\rangle = \alpha^+|0\rangle$
 \Rightarrow ensemble des $n \in \mathbb{N}$



$$E|n\rangle = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})|n\rangle$$

\rightarrow quantité d'énergie $\hbar\omega$

état $|n\rangle$ = n quantité d'énergie $\hbar\omega \rightarrow$ particule \rightarrow photon, photons

vide $|0\rangle$ énergie finie $\frac{1}{2}\hbar\omega$

α^+ : opérateur création

α : opérateur annihilation

Ex: $E + \alpha^+ \rightarrow E_{photon} + \text{partiel harmonique}$
 \downarrow quantité photon \rightarrow
 quantité d'énergie $\hbar\omega \rightarrow$ photon.

Voir: $|0\rangle$ satisfait $\hat{a}|0\rangle = 0$

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} (\hat{x} + \hat{x}^\dagger) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{\sqrt{a}} \hat{a} + \frac{1}{\sqrt{a}} \hat{a}^\dagger \right)$$

$$\hat{a}|0\rangle = \langle x|0\rangle$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{\sqrt{a}} \hat{a} + \frac{1}{\sqrt{a}} \hat{a}^\dagger \right) \hat{a}|0\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \hat{a}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \exp\left(-\frac{m\omega z^2}{2K}\right)$$

\rightarrow on trouve l'ensemble des solutions $\hat{a}_n(z)$ par action de α^+

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\alpha^+)^n |0\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{a}_n(z) = \frac{1}{(n!)^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{\sqrt{a}} - \frac{1}{\sqrt{a}} \hat{a}^\dagger \right)^n \hat{a}|0\rangle$$

$$\text{Rappel: } \begin{cases} \sqrt{2} \hat{a} \hat{a}^\dagger |0\rangle = \sqrt{n!} |n\rangle \quad \text{et} \\ \sqrt{2} \frac{d}{dz} \hat{a}_n(z) = \sqrt{n+1} \hat{a}_{n+1}(z) \end{cases} \Rightarrow \hat{a}_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\left(\frac{z}{\sqrt{a}} - \frac{1}{\sqrt{a}} \hat{a}^\dagger \right)}_{\hat{a}} \hat{a}_n(z)$$

Quantification du champ électromagnétique

$$\vec{E} = \hat{e}(t) \sin(\theta_y) + C \text{ périodiques} \quad k = \frac{\pi}{2} \cdot n$$

$$\vec{B} = \hat{b}(t) \cos(\theta_y)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\partial_t \vec{B} \Rightarrow \vec{k} \cdot \vec{E} = -\partial_t \vec{B} \Rightarrow \begin{cases} \partial_t^2 e + \omega^2 e = 0 \\ \partial_t^2 b + \omega^2 b = 0 \end{cases} \quad \text{avec } \omega = ck$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \epsilon \partial_t \vec{E} \Rightarrow \epsilon c^2 \vec{k} \cdot \vec{B} = \partial_t^2 \vec{E}$$

$$\text{Densité d'énergie: } E = \frac{c}{2} \left(\vec{E}^2 + c^2 \vec{B}^2 \right)$$

$$\Rightarrow E = \frac{c}{4} \sqrt{e^2(t) + c^2 b^2(t)}$$

\rightarrow se quantifie comme un oscillateur harmonique.

en remplaçant les variables adimensionnelles φ on obtient par POH:

$$q = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{E_0}{2}} e \quad \left\{ \begin{array}{l} H = \frac{1}{2} [q^2(t) + \omega^2 q^2(t)] \end{array} \right.$$

$$\left. \begin{aligned} q &= \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{E_N}{2}} e \\ p &= c \sqrt{\frac{E_N}{2}} b \end{aligned} \right\} H = \frac{1}{2} [q^2(t) + \omega^2 p^2(t)]$$

$$\text{cas quantique} \rightarrow E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega (h) \quad \text{avec} \quad \hbar \omega = c \frac{(k \ell)}{p}$$

Etats cohérents et semi-classiques

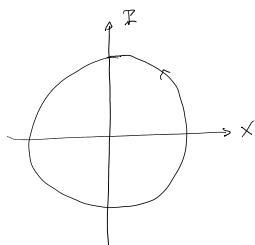
Oscillateur harmonique classique

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{1}{m} p & \xrightarrow{\text{équation de motion}} \quad a = \sqrt{\frac{1}{m\omega}} \\ \frac{dp}{dt} &= -m\omega^2 x & \Rightarrow x = \frac{a}{\omega} \quad I = \frac{a}{\omega} p \end{aligned} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= \sqrt{\frac{m}{\omega}} p = \omega I \\ \frac{dI}{dt} &= -\omega X \end{aligned} \right.$$

$$\text{Par exemple, on introduit } z = \frac{1}{\sqrt{2}} (x + iI)$$

$$\Rightarrow \frac{dz}{dt} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\omega I - i\omega X) = -i\omega z$$

$$\Rightarrow z(t) = z_0 e^{-i\omega t}$$



on retrouve une trajectoire circulaire dans l'espace de Ψ
 $\rightarrow E_n = \text{constante}$ avec conversion cyclique de $E_C \leftrightarrow E_P$

$$E = \frac{\hbar \omega}{2} (X^2 + P^2)$$

$$= \frac{\hbar \omega \cdot 2|z|^2}{2}$$

Référant aux opérateurs d'échelle en MQ, on avait $a = \frac{1}{\hbar \omega} (X + iP)$ (donc si on veut des états semi-classiques on va vers des états les plus proches des états classiques qu'on va décrire).

\rightarrow on cherche des états $|z\rangle$ tel que $a|z\rangle = z|z\rangle$
 . Base naturelle : $\{|n\rangle, n \in \mathbb{N}$ avec $N|n\rangle = n|n\rangle$

$$|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n |n\rangle$$

$$a|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n a|n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n z|n\rangle$$

$$\Rightarrow \lambda_n \sqrt{n} = z \lambda_{n-1}$$

$$\Rightarrow \lambda_n = \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \lambda_0$$

$$\text{Donc } a|z\rangle = \lambda_0 \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

$$\langle z|z\rangle = 1 = \lambda_0^2 \sum_n \frac{|z|^n}{n!} \Rightarrow \lambda_0 = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right)$$

(Δ) $|\langle z|z'\rangle|^2 = \exp(-|z-z'|^2)$: base normée mais pas orthogonale.

$$|\langle n|z\rangle|^2 = \frac{|z|^n}{n!} \exp(-|z|^2) \quad \text{Loi de Poisson.}$$

$$\text{avec } \langle n|_{z>} = \sum_n \langle n| \rho(z) = \sum_n \frac{|z|^n}{(n-1)!} e^{-|z|^2} \quad \left(\sum_n \frac{z^{n-1}}{(n-1)!} = e^{z-1} \right)$$

$$= |z|^{n-1} e^{-|z|^2} = |z|^{n-2}$$

on retrouve que $E \propto |z|^2$, ici $n \propto |z|^2$ et n c'est le nb de quanta d'énergie donc quelque part l'origine
 si $|z|$ petit \rightarrow effet quantique non négligeable).

$$\langle z|X|z\rangle = \frac{1}{\hbar \omega} (\langle z|a + a^\dagger|z\rangle)$$

$$= \frac{1}{\hbar \omega} R_\omega(z)$$

$$\langle z | \hat{x} | z \rangle = \frac{1}{\zeta^2} (\langle z | a + a^\dagger | z \rangle)$$

$$= \frac{1}{\zeta^2} (z \underbrace{\langle z | z \rangle}_{1} + \bar{z}) = \zeta^2 \operatorname{Re}(z)$$

$$\langle z | \hat{p} | z \rangle = \zeta^2 \operatorname{Im}(z)$$

$$\langle z | \hat{H} | z \rangle = \frac{\hbar \omega}{2} (|z|^2 + \frac{1}{2})$$

$$\text{Evolution dans le temps } |\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |z_0\rangle \text{ avec } H = \hbar \omega (\hat{N} + \frac{1}{2}) \rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hbar \omega (\hat{N} + \frac{1}{2}) t} |z_0\rangle = e^{-\frac{i \omega t}{\hbar}} |e^{i \omega t} z_0\rangle$$

du coup comment
on calcule $e^{-i\hat{N}}$?

Partiellement

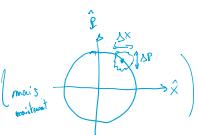
$$e^{\lambda \hat{N}} |z_0\rangle = \exp\left(-\frac{|z_0|^2}{2}\right) e^{\lambda \hat{N}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z_0^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

$$= \exp\left(-\frac{|z_0|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z_0^n}{\sqrt{n!}} e^{\lambda n} |n\rangle = |e^{\lambda z_0}\rangle$$

si $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ alors $e^{\lambda \hat{N}} |n\rangle = e^{\lambda n} |n\rangle$

$\sum_n \frac{z_0^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$

exponentielle d'opérateur?
→ peut analytique
de l'éq pas on applique l'opérateur résolvant)



→ même dynamique que état classique reste cohérent au cours du temps.

$$\langle x^2 \rangle_z = \frac{1}{2} \langle z | (a + a^\dagger)(a + a^\dagger) | z \rangle$$

On connaît $|z|\langle z|$ et $\langle z|a^\dagger$ donc on remplace a à droite d' a^\dagger à gauche via relation de commutation $[a, a^\dagger] = 1$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle x^2 \rangle_z &= \frac{1}{2} \langle z | \underbrace{a^2 + a a^\dagger + a^\dagger a + a^2}_{a^2 + 1} | z \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle z | a^2 + 2a^\dagger a + a^\dagger + 1 | z \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left(|z|^2 + 2|z|^2 + \bar{z}^2 + 1 \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + (z + \bar{z})^2 \right) \Rightarrow \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$\langle p^2 \rangle_z = \frac{1}{2} \langle z | (a - a^\dagger)(a - a^\dagger) | z \rangle = \frac{1}{2} (1 - (z - \bar{z})^2)$$

$$\Rightarrow \Delta p = \Delta x = \frac{1}{\hbar \zeta}$$

$\Delta x \Delta p = \frac{1}{2}$ (Heisenberg minimal!) même incertitude sur X et P et minimal \Rightarrow meilleur état quantique qu'à priori conceivable pour caractériser l'état chargé = état semi-classique (optimal).

→ semi-classique (connaissance optimale de l'état chargé).

\Rightarrow (def est semi-chaque $\Delta x = \Delta p$
- $\Delta x \Delta p = \frac{1}{2}$, minima Heisenberg)

Semi-classique: retrouvé à $|z| \gg 1$

→ indétermination sur énergie

$$\begin{aligned} \langle z | H | z \rangle &= \left(\frac{\hbar \omega}{2}\right)^2 \langle z | (a^\dagger a + \frac{1}{2}) | z \rangle \\ &= \left(\frac{\hbar \omega}{2}\right)^2 \langle z | \underbrace{a^\dagger a a^\dagger a}_{a^2 + 1} + \underbrace{a^\dagger a + \frac{1}{2}}_{1} | z \rangle \end{aligned}$$

$$= \left(\frac{\hbar \omega}{2}\right)^2 \langle z | a^\dagger a a^\dagger a + 2a^\dagger a + \frac{1}{2} | z \rangle$$

$$= \left(\frac{\hbar \omega}{2}\right)^2 \left(|z|^4 + 2|z|^2 + \frac{1}{2} \right)$$

$$\Rightarrow \langle z | H | z \rangle = \underbrace{\left[\left(\frac{\hbar \omega}{2}\right) \left(|z|^2 + \frac{1}{2} \right) \right]^2}_{\text{Etat}} + \left(\frac{\hbar \omega}{2}\right)^2 |z|^2$$

$$\Rightarrow \Delta E = \frac{\hbar \omega}{2} |z|$$

- 1 - 0 dans le limit $|z| \rightarrow \infty$ état semi-classique

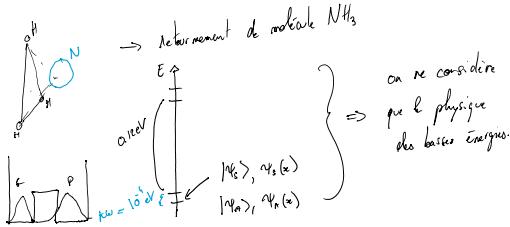
$\Delta x = \frac{1}{\hbar \zeta}$ dépend pas de $|z|$, quantité nécessaire quand $\Delta x \ll \Delta p$ en énergie ça se traduit par $\frac{\Delta E}{E} \approx \frac{1}{|z|}$

$$\Rightarrow \Delta E = \frac{\hbar \omega}{2} |z|$$

$$\Rightarrow \frac{\Delta E}{E} \sim \frac{1}{|z|^2} \xrightarrow{|z| \rightarrow \infty} 0 \quad \text{dans le limit il n'y a pas de semi-classique}$$

$\Delta x = \frac{\hbar}{E}$ dépend pas de $|z|$, quantité nécessaire quand $\Delta x \ll \hbar$
 $\Delta E = \frac{\hbar^2}{E}$ en énergie sa se traduit par $\frac{\Delta E}{E} \sim \frac{1}{|z|^2}$

III. Système à 2 niveaux - molécule d'ammonium



\Rightarrow on se restreint aux états $|N\rangle = \lambda |N_a\rangle + \mu |N_s\rangle$

\Rightarrow espace (de Hilbert) des états de dimension 2.

- Opérateur $\hat{O} \Rightarrow$ restriction à l'espace des $\lambda |N_a\rangle + \mu |N_s\rangle$

$$\text{Etat } \begin{pmatrix} 1 \\ \mu \end{pmatrix} \Leftrightarrow |N\rangle = \lambda |N_a\rangle + \mu |N_s\rangle$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow |N_a\rangle ; \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Leftrightarrow |N_s\rangle$$

\Rightarrow état = vecteur dim 2 ; opérateur = matrice $2 \times 2 \quad \begin{pmatrix} A & C \\ D & B \end{pmatrix} = 0$

opérateur auto-adjoint $\langle \overline{N_p} | \hat{O} | N_q \rangle = \langle N_2 | \hat{O} | N_p \rangle$

$$\Rightarrow \text{matrice } O^T = \overline{O}$$

$$\Rightarrow \begin{array}{l|l} \overline{A} = A & \overline{C} = D \\ \overline{B} = B & \end{array}$$

$A, B \in \mathbb{R}$

$$\Rightarrow O = \begin{pmatrix} a+d & b-i\epsilon \\ b+i\epsilon & a-d \end{pmatrix}$$

$$= a \mathbb{1} + b \overline{\sigma_x} + c \overline{\sigma_y} + d \overline{\sigma_z}$$

avec $\overline{\sigma}_x$ = matrice de Pauli $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$$\overline{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \overline{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \overline{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\overline{\sigma}_x^2 > 1$$

$$\overline{\sigma}_x \overline{\sigma}_p = -\overline{\sigma}_p \overline{\sigma}_x \quad \alpha \neq \beta$$

$$\overline{\sigma}_x \overline{\sigma}_p = i \sum_j \epsilon_{ijk} \overline{\sigma}_p \Rightarrow \begin{cases} \overline{\sigma}_x \overline{\sigma}_y = i \overline{\sigma}_z & \text{si } \alpha \neq \beta \\ \overline{\sigma}_y \overline{\sigma}_x = i \overline{\sigma}_z \\ \overline{\sigma}_z \overline{\sigma}_x = i \overline{\sigma}_y \end{cases}$$

$= i \epsilon_{ijk} \overline{\sigma}_j \text{ avec } i, j, k \in \{x, y, z\}$

Diagonalisation de O :

$$(O - a \mathbb{1})^2 = (b \overline{\sigma}_x + c \overline{\sigma}_y + d \overline{\sigma}_z)(b \overline{\sigma}_x + c \overline{\sigma}_y + d \overline{\sigma}_z)$$

$$= b^2 \overline{\sigma}_x^2 + bc \overline{\sigma}_x \overline{\sigma}_y + bd \overline{\sigma}_x \overline{\sigma}_z \\ + ca \overline{\sigma}_y \overline{\sigma}_x + cb \overline{\sigma}_y \overline{\sigma}_z + cd \overline{\sigma}_y \overline{\sigma}_z \\ + db \overline{\sigma}_z \overline{\sigma}_x + dc \overline{\sigma}_z \overline{\sigma}_y + d^2 \overline{\sigma}_z^2$$

$$\Rightarrow \text{valeurs propres de } (O - a \mathbb{1})^2 = b^2 + c^2 + d^2$$

$$\Rightarrow \text{valeurs propres de } O = a \pm \sqrt{b^2 + c^2 + d^2} \quad \text{avec } O = a \mathbb{1} + (b \overline{\sigma}_x + c \overline{\sigma}_y + d \overline{\sigma}_z)$$

→ principe de Npbz



dans base $|G\rangle, |D\rangle$

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix} \rightarrow \text{énergies } E_0 \pm |A| \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$$

effet tunnel "effectif"

(force off-diagonale due à des A-B) (contrarié avec la main).

ici on fixe la phase ϕ_0 en général $-\frac{\pi}{2} \cos \theta_{12} - \frac{\pi}{2} \sin \theta_{12} \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta} \end{pmatrix}; \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix}$
mais ici chose A < 0 $\Rightarrow \theta = 0$

$$\Rightarrow \text{Hamiltonien effectif } H = E_0 \mathbb{1} - \frac{\hbar \omega}{2} \sigma_x$$

• États propres de H = états propres de σ_x = $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

$$\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}; \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

Système à 2 niveaux - Ex de NH_3

• Base naturelle par états de base E : $|V_0\rangle, |V_1\rangle$

$$\rightarrow H = \begin{pmatrix} E & -\frac{\hbar \omega}{2} \\ -\frac{\hbar \omega}{2} & E \end{pmatrix} \rightarrow 2 \text{ énergies } E_{\pm} = E_0 \pm \frac{\hbar \omega}{2}$$

$$|V_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

→ Evolution d'un tel système:

→ base adéquate: $\{|V_0\rangle, |V_1\rangle\}$

$$|\psi\rangle = \lambda |V_0\rangle + \mu |V_1\rangle \sim \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle \Leftrightarrow |\psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_0 t\right) \begin{pmatrix} \lambda \exp\left(\frac{i\hbar \omega t}{2}\right) \\ \mu \exp\left(-\frac{i\hbar \omega t}{2}\right) \end{pmatrix}$$

$$\text{or } |V_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ dans la base } |V_0\rangle, |V_1\rangle$$

$$|V_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

pourquoi base $|V_0\rangle, |V_1\rangle$ comme base?

→ opérateur position \hat{x} tel que $\hat{x}|V_0\rangle = +|V_0\rangle$
 $\hat{x}|V_1\rangle = -|V_1\rangle$

$$\Rightarrow \hat{x} = \hat{x}_{\text{base}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ dans base } |V_0\rangle, |V_1\rangle$$

→ pour état $|V_0\rangle$, quel "partage"?

$$\langle \psi(t)|\hat{x}|\psi(t)\rangle = e^{i\frac{\hbar \omega}{2}t} \left(I e^{\frac{i\hbar \omega}{2}t} / \mu e^{-\frac{i\hbar \omega}{2}t} \right) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda e^{\frac{i\hbar \omega}{2}t} \\ \mu e^{-\frac{i\hbar \omega}{2}t} \end{pmatrix} e^{-i\frac{\hbar \omega}{2}t}$$

$$= \overline{\lambda} \mu e^{i\hbar \omega t} + \overline{\mu} \lambda e^{-i\hbar \omega t}$$

$$\text{si } \hat{x} = 0 \quad |\psi(t=0)\rangle = |V_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \langle \psi(t)|\hat{x}|\psi(t)\rangle = \cos(\omega t) \text{ oscille entre } G \text{ et } D.$$

Effet d'un champ électrique

→ configuration $|V_0\rangle$ et $|V_1\rangle$ portent 2 dipôles électriques $\pm d_0$

$$1 \in \mathbb{C}, \mathbb{C} \text{ "algebre" } \hat{X} = -\vec{Q} \cdot \vec{E}$$

Effet d'un champ électrique

→ configuration $|N_0\rangle$ et $|N_\pm\rangle$ portant 2 dipôles électriques $\pm d_0$

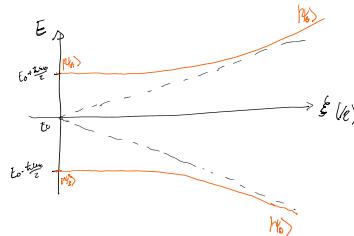
→ énergie d'interaction "classique" $W = -\vec{D} \cdot \vec{E}$

$$\text{quand } \vec{D} = d_0 \hat{z} = d_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{Dès lors dans la base } |N_0\rangle, |N_\pm\rangle \quad H = \begin{pmatrix} E_0 - \frac{k_{\text{dip}}}{2} & -\ell \\ -\ell & E_0 + \frac{k_{\text{dip}}}{2} \end{pmatrix} \text{ avec } \ell = d_0 E$$

$$\Rightarrow H = E_0 \mathbb{1} - \frac{k_{\text{dip}}}{2} \tau_z - \gamma \sigma_z$$

$$\rightarrow E = E_0 \pm \left(\left(\frac{k_{\text{dip}}}{\epsilon} \right)^2 + \ell^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$



$$\text{Etats propres} \quad H = E_0 \mathbb{1} - \left[\left(\frac{k_{\text{dip}}}{\epsilon} \right)^2 + \ell^2 \right] \begin{pmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{pmatrix}$$

$$\text{avec } \tan 2\theta = \frac{\ell}{\frac{k_{\text{dip}}}{\epsilon}} \quad , \quad -\frac{\pi}{4} < \theta < \frac{\pi}{4}$$

$$E_- = E_0 - \sqrt{\ell^2 + \left(\frac{k_{\text{dip}}}{\epsilon} \right)^2} \quad \Leftrightarrow \quad |N_-> = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}$$

$$\cos 2\theta \cos \theta + \sin 2\theta \sin \theta = \cos \theta$$

$$\sin 2\theta \cos \theta - \cos 2\theta \sin \theta = \sin \theta$$

$$E_+ = E_0 + \sqrt{\ell^2 + \left(\frac{k_{\text{dip}}}{\epsilon} \right)^2} \quad \Leftrightarrow \quad |N_+> = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}$$

$$\Theta \text{ petit} \rightarrow |N_-\rangle \approx |N_0\rangle + \frac{\ell}{2 \frac{k_{\text{dip}}}{\epsilon}} |N_+\rangle$$

$$\sim \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{avec } 2 \theta \approx \frac{\ell}{\frac{k_{\text{dip}}}{\epsilon}}$$

$$|N_-\rangle \sim |N_0\rangle - \frac{\ell}{k_{\text{dip}}} |N_+\rangle$$

$$\Rightarrow \langle N_\mp | \hat{D} | N_\pm \rangle \sim \pm \frac{\ell}{k_{\text{dip}}} d_0 \simeq \pm \frac{d_0 \ell^2}{k_{\text{dip}}} E$$

Si maintenant champ électrique inhomogène $E(x)$ (j'ai un gradient d'énergie, j'ai une force $F = -\nabla V$)

→ forces sur molécules opposées par état $|N_\pm\rangle$

Champ à variation selon x :

$$\rightarrow \text{localiser } |N_+\rangle \text{ ou } |N_-\rangle \quad \left. \begin{array}{l} \text{éjecter } |N_-\rangle \text{ ou } |N_+\rangle \\ \text{éjecter } |N_+\rangle \text{ ou } |N_-\rangle \end{array} \right\} \text{ Préparation de NH}_3 \text{ dans son état excité}$$

E
 (comme on a un état excité, naturellement via couplage avec l'atome)
 (on déplete ça en déposant une énergie)
 mais processus très lent. (faible couplage, T ~ 1000 K).

→ Emission stimulée par $E(t)$ (DIASER)

(RPN) (même principe qu'un champ tournant pour le spin)

$$\rightarrow H = \begin{pmatrix} E_0 - \frac{k_{\text{dip}}}{\epsilon} & -d_0 E(t) \\ -d_0 E(t) & E_0 + \frac{k_{\text{dip}}}{\epsilon} \end{pmatrix} \quad \text{avec } E(t) = E_0 \cos(\omega t)$$

$$H = E_0 \mathbb{1} - \frac{k_{\text{dip}}}{2} \tau_z + \gamma \sigma_z \quad \text{avec } \gamma(t) = \frac{k_{\text{dip}}}{2} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) = d_0 E(t)$$

À 3 fréquences: ω_{dip} : fixe par sys à 2 niveaux

$\Delta 3$ fréquences: deux fixe par sys à 2 niveaux

. $\hbar\omega_{\text{ext}}$: intérêt de forçage (couplage du sys à 2 niveaux à l'environnement $E(t)$)

. $\hbar\omega \ll \hbar\omega_{\text{ext}}$: fréquence de forçage (paramètre expérimental).

On connaît le résultat pour $\psi = \text{const}$ \rightarrow méthode de la variation de la constante.

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_s(t) \\ c_a(t) \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} i\hbar \dot{c}_s = (E_0 - \frac{\hbar\omega_{\text{ext}}}{2}) c_s + \eta(t) c_a \\ i\hbar \dot{c}_a = (E_0 + \frac{\hbar\omega_{\text{ext}}}{2}) c_a + \eta(t) c_s \end{cases}$$

Méthode naïve: variation de la constante $c_s(t) = \chi_s(t) \exp\left(\frac{-i}{\hbar}(E_0 - \frac{\hbar\omega_{\text{ext}}}{2})t\right)$
 $c_a(t) = \chi_a(t) \exp\left(\frac{-i}{\hbar}(E_0 + \frac{\hbar\omega_{\text{ext}}}{2})t\right)$

$$\Rightarrow i\hbar \dot{\chi}_s = -\chi_a \hbar\omega_{\text{ext}} \left[\underbrace{\exp(i(\omega - \omega_0)t)}_{\text{forçage résonant à } \omega_0} + \underbrace{\exp(i(\omega + \omega_0)t)}_{\text{nigligeable car } \omega_0 \text{ très petit.}} \right] \quad \approx \text{approximation scolaire.}$$

Approximation scolaire: néglige les termes rapides en $\exp(i(\omega + \omega_0)t)$

$$\Rightarrow H \approx E_0 \mathbb{1} - \frac{\hbar\omega_{\text{ext}}}{2} \sigma_z + \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix}$$

Problème $H(t)!$ $i\hbar \frac{dH}{dt} = H(t) |\psi(t)\rangle$

\rightarrow méthode du référentiel tournant.

[japonais] $\rightarrow |\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(t=0)\rangle$ avec $U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right)$ dynamique dans $k|k\rangle$
point de vue de Schrödinger: on doit calculer si \hat{H} évolue au temps et que H diagonalisable.

• Heisenberg $\langle \hat{\psi}_{\text{ext}}(t) | \hat{A} | \hat{\psi}_{\text{ext}}(t) \rangle$ dynamique dans $U(t)$

$$= \langle \psi(t=0) | \underbrace{U^\dagger(t) \hat{A} U(t)}_{A_H} | \psi(t=0) \rangle$$

$\&$ $H(t) \neq U(t)$ est complexe, mais une partie de l'évolution facile à calculer

plus vu mixte: si on se place dans l'ef de l'ori, pas évident. Suffisant si forçage

• Pt de vue de Dirac (la interaction)

$$V(t) \hat{\psi}_{\text{ext}}(t) \in |\psi(t)\rangle_{\text{tot}} = U_0(t) |\tilde{\psi}(t)\rangle = U_0(t) \underbrace{|V(t=0)\rangle}_{\text{on a retrouvé la partie facile.}}$$

$$\downarrow \text{comme } \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right)$$

$$\text{eq de Schrödinger: } i\hbar \frac{d}{dt} V(t) = \left(H_0 + V(t)\right) V(t) \quad \text{avec } V(t) = U_0(t) \tilde{U}(t)$$

$$\Rightarrow i\hbar \left(\frac{dU_0}{dt} \tilde{U} + U_0 \frac{d\tilde{U}}{dt} \right) = (H_0 + V) U_0 \tilde{U}$$

$$\text{avec } i\hbar \frac{dU_0}{dt} = H_0 U_0$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d\tilde{U}}{dt} = \underbrace{(U_0^{-1} W U_0)}_{H_{\text{eff}}} \tilde{U}(t) \quad \text{donc c'est bien un changement de base vers un référentiel qui dépend du temps (ref tournant).}$$

\int méthode référentiel

$$\text{on report sur notre problème: } H \approx E_0 \mathbb{1} - \frac{\hbar\omega_{\text{ext}}}{2} \sigma_z + \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix}$$

changement de
l'origine de t

$$\sigma_z = \frac{1}{2} (\Gamma_x + i\Gamma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_- = \frac{1}{2} (\Gamma_x - i\Gamma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow H = -\frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z - \hbar\omega_0 \left(e^{i\omega t} \sigma_+ + e^{-i\omega t} \sigma_- \right)$$

$$\text{On a } \left[\vec{\nabla}_x, \vec{\nabla}_z \right] = \pm 2 \vec{\nabla}_z$$

Schrödinger

$$\text{Méthode de repr. de Dirac: } |\tilde{\psi}(t)\rangle = U_0(t) \overbrace{|\tilde{\psi}(t)\rangle}^{\text{Schrödinger}}$$

$$\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\vec{\nabla}_z\right) \rightarrow \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\vec{\nabla}_z\right)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \left(\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\vec{\nabla}_z\right) |\psi(t)\rangle \right)$$

$$= \frac{1}{2} \hbar \omega \vec{\nabla}_z |\tilde{\psi}(t)\rangle + \left(e^{-\frac{i\omega t}{2}\vec{\nabla}_z} H e^{i\frac{\omega t}{2}\vec{\nabla}_z} \right) |\tilde{\psi}(t)\rangle$$

$$\mathcal{O}_n \propto \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\vec{\nabla}_z\right) \vec{\nabla}_z \exp\left(\frac{i\omega t}{2}\vec{\nabla}_z\right) = \vec{\nabla}_z$$

$$\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\vec{\nabla}_z\right) \vec{\nabla}_z \exp\left(\frac{i\omega t}{2}\vec{\nabla}_z\right) = \vec{\nabla}_z(t)$$

$$\frac{d}{dt} \vec{\nabla}_z(t) = -\frac{i}{2} \omega \left(\exp\left(-\frac{i}{2}\omega t \vec{\nabla}_z\right) \underbrace{(\vec{\nabla}_z \vec{\nabla}_z - \vec{\nabla}_z \vec{\nabla}_z)}_{\pm 2\vec{\nabla}_z^2} \exp\left(\frac{i}{2}\omega t \vec{\nabla}_z\right) \right)$$

$$= \mp i\omega \vec{\nabla}_z$$

$$\Rightarrow \tilde{\psi}_z(t) = \exp\left(\mp i\omega t\right) \vec{\nabla}_z$$

$$\Leftrightarrow i\hbar \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}(t)\rangle = \left[\frac{1}{2} \hbar \omega \vec{\nabla}_z - \frac{\hbar \omega_0}{2} \vec{\nabla}_z - \hbar \omega e^{i\omega t} e^{-i\omega t} \vec{\nabla}_+ - \hbar \omega e^{-i\omega t} e^{i\omega t} \vec{\nabla}_- \right] |\tilde{\psi}(t)\rangle$$

dès le début de $e^{\pm i\omega t \vec{\nabla}_z}$ qu'on a classé pour voir la dépendance
méthode générale c'est H_0 puis rebrancher
le terme simple, souvent c'est H_0 , mais ici
ça marche pas vraiment ...

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

$$\text{avec } \tilde{H}(\infty) = \frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{2} \vec{\nabla}_z - \frac{\hbar \omega_1}{2} \vec{\nabla}_z$$

$$\Rightarrow \text{valeurs propres } \pm \frac{\hbar}{2} \mathcal{Q} \text{ avec } \mathcal{Q}^2 = (\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2$$

$$\Rightarrow |\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{U}(t) |\psi(t=0)\rangle \quad \text{avec } \tilde{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \tilde{H} t\right)$$

$$|\psi(t=0)\rangle$$

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i\hbar t}{2} \hat{n}_z \vec{\nabla}_z + \hat{n}_z \vec{\nabla}_x\right) \quad \text{avec } n_{z0} = -\frac{\omega_1}{\omega} \quad p_z = \frac{\omega - \omega_0}{\mathcal{Q}}$$

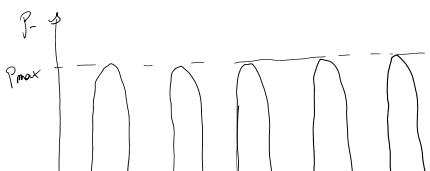
$$H = \frac{\hbar \mathcal{Q}}{2} \left(\underbrace{\hat{n}_x \vec{\nabla}_x + \hat{n}_y \vec{\nabla}_y + \hat{n}_z \vec{\nabla}_z}_{\vec{n} \cdot \vec{\nabla}} \right) \quad \left. \begin{array}{l} \text{car } (\vec{n}, \vec{\nabla})^2 = 1 \\ (\vec{n}, \vec{\nabla})^{\text{anti}} = \vec{n} \cdot \vec{\nabla} \end{array} \right.$$

$$= \frac{1}{2} \mathcal{Q} \cos \frac{\mathcal{Q} t}{2} - i (\vec{n} \cdot \vec{\nabla}) \sin \frac{\mathcal{Q} t}{2}$$

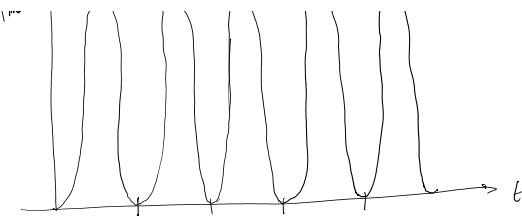
Initialement état excité \rightarrow état fondamental.

$$P_x(t) = \left| \langle \psi_x | \tilde{U}(t) | \psi_x \rangle \right|^2$$

$$= \frac{\omega_1^2}{\mathcal{Q}^2} \sin^2 \frac{\mathcal{Q} t}{2}$$



Oscillations de Rabi:
 $t = 0, 0.5, \dots$

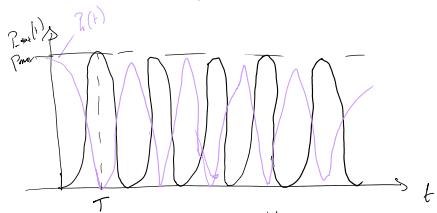


Oscillations de Rabi.
(à la polarisation S)

$$\gamma_{\max} = \frac{\omega_i^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_i^2} \quad \text{si } \omega = \omega_0 \Rightarrow \gamma_{\max} = 1$$

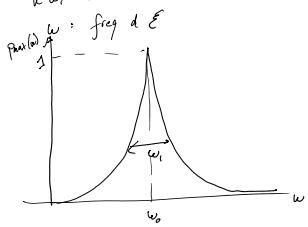
Molécule NH_3 + rayonnement $E(t)$

$$P_{trans}(t) = \frac{\omega_i^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_i^2} \sin^2 \left[\sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_i^2} \frac{t}{2} \right]$$



$\hbar \omega_0$: énergie entre les 2 états $\rightarrow \nu = 24 \text{ GHz}$ pour NH_3

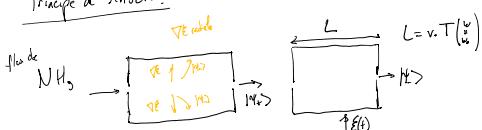
$\hbar \omega_i$: intensité d'E



Passage de l'état $|N\rangle$ à $|N'\rangle$ au bout de $t=T$
(ex: 1s)

→ émission (stimulée) de photons à $\hbar \omega_0$

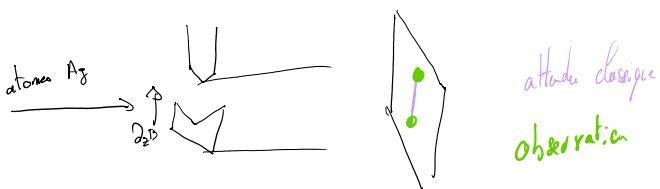
Principe du LASER :



Chapitre 4: Le moment cinétique

08 November 2024 16:16

Stern et Gerlach



Si μ_B se comporte comme un moment cinétique \Rightarrow nb impaires de tâches (3)
 \Rightarrow Spin \neq moment cinétique.

Chap 4: Le moment cinétique

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

classiquement

\rightarrow utile pour décrire la dynamique de rotation.

I. Algèbre des opérateurs \hat{L}_x

$$\rightarrow \hat{t} = \hat{x} \times \hat{p} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \hat{L}_z = \hat{x}_y \hat{p}_z - \hat{x}_z \hat{p}_y \\ \vdots \\ [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \left[\hat{x}_y \hat{p}_z - \hat{x}_z \hat{p}_y, \hat{x}_z \hat{p}_x - \hat{x}_x \hat{p}_z \right] \end{array} \right.$$

tut les autres termes
commute \Rightarrow donc nul

y a des \wedge partout
mais le prof a la
flamme.

$$= \hat{x}_y \underbrace{[\hat{p}_y, \hat{x}_y]}_{-i\hbar} \hat{p}_z - \alpha_x \underbrace{[\hat{x}_y, \hat{p}_z]}_{i\hbar} p_y$$

$$= i\hbar L_z$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_z \quad [\hat{L}_x, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$$

$$\rightarrow \hat{t} \times \hat{t} = i\hbar \hat{t}$$

Relation caractéristique des moments cinétiques

NB: $\hat{L}_{\text{tot}} = \sum_i \hat{L}_i$: m relations.

\rightarrow Ensemble des moments cinétiques qui satisfont ces relations sont notés \mathcal{T} (et on va voir que certains ne sont pas admissibles...)

II. Valeurs propres de moment cinétique

$$\lambda_1 = \frac{\hbar^2}{m} \quad \lambda_2 = \hbar^2 / (m + \frac{J^2}{m})$$

Soit $\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$

$$[J_z, \vec{J}^2] = [J_z, J_x^2 + J_y^2 + J_z^2] \quad (\text{or } [A, BC] = [A, B]C + B[A, C])$$

$$\begin{aligned} &= J_y \underbrace{[J_x, J_y]}_{i\hbar J_z} + \underbrace{[J_x, J_y]}_{-i\hbar J_z} J_y + J_z \underbrace{[J_x, J_y]}_{-i\hbar J_z} + [J_x, J_y] J_z \\ &= i\hbar (J_y J_z + J_z J_y) - i\hbar (J_y J_z + J_z J_y) = 0 \end{aligned}$$

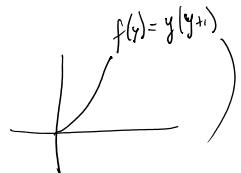
$$\rightarrow [\vec{J}_z, \vec{J}^2] = 0 \quad \forall z = x, y, z$$

par convention \rightarrow diag simultanément J^2 et J_z

on choisit les états $|j, m\rangle$ tel que

on pose pour la constante positive c'est $j(j+1)\hbar^2$.

$(J^2 \text{ est positif car } \langle \psi | J^2 | \psi \rangle = \langle \psi | J^\dagger J | \psi \rangle \geq 0)$



$$J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

$$\rightarrow \hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y \quad ; \quad \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$$

$$[\vec{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0$$

$$[J_z, \hat{J}_\pm] = \underbrace{[J_z, J_x]}_{i\hbar J_y} \pm i \underbrace{[J_z, J_y]}_{-i\hbar J_z} = \pm i\hbar J_\pm$$

$$\hat{J}^2 \underbrace{J_\pm |j, m\rangle}_{\text{up de } J^2} = \hat{J}_\pm J^2 |j, m\rangle = \underbrace{\hbar j(j+1)}_{\text{up de } J^2} \hat{J}_\pm |j, m\rangle$$

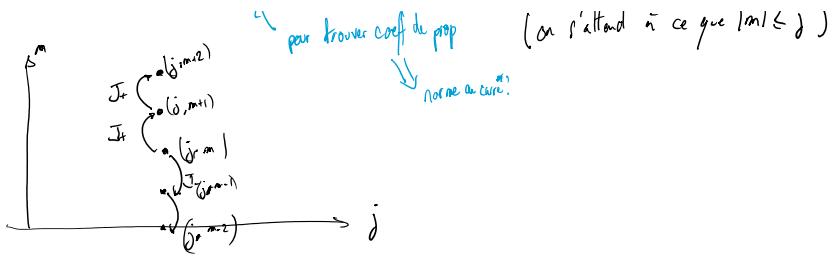
$$\Rightarrow J_\pm |j, m\rangle \propto |j, m'\rangle$$

$$\begin{aligned} J_z J_\pm |j, m\rangle &= (J_\pm J_z \pm \hbar J_\pm) |j, m\rangle \quad \text{or } [J_z, \hat{J}_\pm] = \pm i\hbar J_\pm \\ &= \hbar(m \pm 1) J_\pm |j, m\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow J_\pm |j, m\rangle \propto |j, m \pm 1\rangle$$

par trouver coeff de prop
norme au cercle
(on s'attend à ce que $|m| \leq j$)

$$J_z \left(\frac{|j, m+1\rangle}{\sqrt{j-j+1}} \right)$$



$$\begin{aligned} \left| \left\langle J_{\pm} \mid j, m \right\rangle \right|^2 &= \left\langle j, m \mid J_{\pm}^{\dagger} J_{\pm} \mid j, m \right\rangle \quad \left\{ \begin{array}{l} (J_x \pm i J_y)^{\dagger} = J_x \mp i J_y \\ J_{\mp}^{\dagger} = J_{\pm} \end{array} \right. \\ &= \left\langle j, m \mid J_{\mp} J_{\pm} \mid j, m \right\rangle \end{aligned}$$

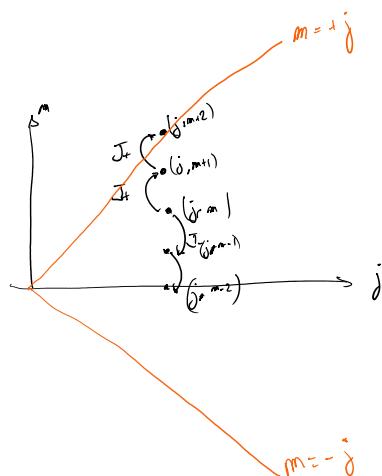
$$J_{\mp} J_{\pm} = (J_x \mp i J_y)(J_x \pm i J_y)$$

$$= \underbrace{J_x^2 + J_y^2}_{J^2 - J_x^2} \pm i \underbrace{(J_x J_y - J_y J_x)}_{i \hbar J_z}$$

$$\Rightarrow \left\langle j, m \mid J_{\mp} J_{\pm} \mid j, m \right\rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m \pm 1)] \geq 0$$

car une norme

$$\Rightarrow -j \leq m \leq j \quad \left\{ \begin{array}{l} j(j+1) > m(m+1) \text{ donne une contrainte} \\ j(j+1) > m(m-1) \text{ l'autre} \end{array} \right.$$



$$\text{à } j \text{ fixé, } m_{\max} \rightarrow \left\langle J_{+} \mid j, m_{\max} \right\rangle = 0$$

$$\Rightarrow m_{\max} = +j$$

$$m_{\min} = m_{\max} - N \text{ avec } N \in \mathbb{N}$$

$$J_{-} \mid j, m_{\min} \rangle = 0$$

$$\hookrightarrow m_{\min} = -j$$

$$\Rightarrow j - N = -j \rightarrow \boxed{N = 2j \Rightarrow j \in \mathbb{N} \text{ et } j \in \frac{1}{2}\mathbb{N}}$$

$$\cdot \left\langle j, m \mid J_x \mid j, m \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle j, m \mid J_x + J_z \mid j, m \right\rangle = 0$$

on retrouve de Heisenberg si je connais J_z je connais pas J_x, J_y .

III. Moment cinétique orbital

• plutôt que $(x, y, z) \rightarrow (r, \theta, \varphi)$ (coord sphériques)

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \partial_{\varphi} \quad \varphi = \text{angle azimuthal ? en tout cas } \varphi \in [0, 2\pi] \text{ non autour de } \vec{\Theta}^2$$

$$\mathcal{L}_z = \frac{\hbar}{i} \partial_\varphi \quad \varphi = \text{angle azimuthal? en tout cas } \varphi \in [0, 2\pi] \text{ rot autour de } \vec{D}^\varphi$$

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) \leftarrow |l, m\rangle$$

$$\mathcal{L}_z Y_{l,m} = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi) \Rightarrow Y_{l,m}(\theta, \varphi) = f(\theta) \exp(i m \varphi)$$

int de harmonique sphérique

$Y_{l,m}$: fonction d'onde, valeur en tout point unique

$$\Rightarrow e^{im 2\pi} = 1 \Rightarrow m \in \mathbb{N}$$

\Rightarrow valeur Y entière de $|l, m\rangle \rightarrow$ pas des \vec{l} \Rightarrow spin!

Expérience:

→ dévier trajectoire de particules en fonction de moment magnétique $\vec{\mu} \leftarrow$ moment cinétique orbital

- particule soumise à \vec{B}_z inhomogène $F_z = \mu_B \partial_z B_z$

- moment magnétique $\vec{\mu}$ dans \vec{B} : $W = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ + couple $\vec{T} = \vec{\mu} \times \vec{B}$
si \vec{B} est inhomogène → force $\vec{F} = \vec{B}(\vec{r}, \vec{B})$

- particule de charge (-e) en rotation

$$\text{Lé} \quad \text{moment orbital} \quad \vec{L} = \vec{a} \times \vec{p} = m_2 \omega \cdot \vec{a}$$

$$\text{Orbital} \quad \text{moment magnétique} \quad \vec{\mu} = I \cdot S \vec{L}$$

$$I = \frac{(-e) \omega}{2\pi r}, S = \pi r^2 \Rightarrow \vec{\mu} = \gamma_0 \vec{L} \text{ avec } \gamma_0 = \frac{-e}{2\pi m}$$

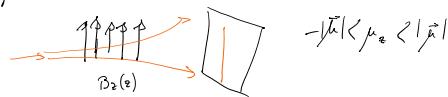
$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{R} = \vec{\mu} \times \vec{B} = \gamma_0 (\vec{L} \times \vec{B})$$

⇒ précession de \vec{L} autour de \vec{B}

Si $\vec{B} \parallel z$, L_z conservé, $L_x, L_y \approx 0$ au moyen.

- Si $B_z(z) \rightarrow$ force $F_z = \mu_B \partial_z B_z$

⇒ classification



$$\text{quantifiant } f_{1z} = \gamma_0 \hat{L}_z$$

$\hat{L}_z \rightarrow$ valeur entière \rightarrow nb impose de tache

$\left(\begin{array}{l} \text{Nb paire de tache?} \rightarrow \text{valeur demi-entière} \rightarrow \text{spin } \vec{\mu} = \gamma \vec{J} \\ \text{Lg généralement } \vec{\mu} = \gamma \vec{J} \end{array} \right)$

Le Spin

→ 1ère grandeur intrinsèquement quantique (pas d'aucune chaîne)

↳ Nouvelle propriété d'objet quantique
Spin = moment cinétique intrinsèque, caractérisé par $S=j$

Ex: c porte un spin $S=\frac{1}{2}$

S: entier ou demi-entier

I - Espace de Hilbert de $S=\frac{1}{2}$

2 valeurs possibles de $S_z = \pm \frac{1}{2}\hbar$, $m_z = \pm \frac{1}{2}\hbar$

→ dimension de l'espace de Hilbert = 2

• Mesure de S_z dans la direction \vec{n} : \hat{S}_z : 2 valeurs possibles $\pm \frac{1}{2}\hbar$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 = \hbar^2 S(S+1) \quad (S=\frac{1}{2})$$

et $|+\frac{1}{2}\rangle$: état propre de \hat{S}_z , $+\frac{1}{2}\hbar$

$|-\frac{1}{2}\rangle$: $-\frac{1}{2}\hbar$

avec $S_x |+\rangle = 0$

$$S_y |+\rangle = \frac{\hbar}{2} \left(\underbrace{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+i)}_{S_z(+1)} - \underbrace{\frac{1}{2}(-\frac{1}{2}+1)}_{m(m+1)} \right)^{\frac{1}{2}} |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle$$

$$\Rightarrow S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$S_z |+\rangle = 0$

$$S_z |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle \left(= \frac{\hbar}{2} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}) \right)^{\frac{1}{2}} |+\rangle \right)$$

$$\Rightarrow S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} (\hat{S}_+ + \hat{S}_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}_x$$

$$\hat{S}_y = \frac{1}{2i} (\hat{S}_+ - \hat{S}_-) = \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}_y$$

$$(\rightarrow on retrouve \vec{\sigma}_x \times \vec{\sigma}_y = 2i \vec{\sigma}_z)$$

• Etat propre de \hat{S}_z : $|+\rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\hat{S}_y : |+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

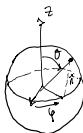
• Etat propre d'un spin galéonique $|\varepsilon\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle$

$$\rightarrow \text{Normalisation} \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad 0 \leq \theta \leq \pi$$

$$(\hookrightarrow |\alpha| = \cos(\frac{\theta}{2}), |\beta| = \sin(\frac{\theta}{2}))$$

$$\text{et phase de } \alpha^* \beta = e^{i\varphi} \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

$$\Rightarrow |\varepsilon\rangle = e^{i\frac{\varphi}{2}} \cos(\frac{\theta}{2}) |+\rangle + e^{i\frac{\varphi}{2}} \sin(\frac{\theta}{2}) |-\rangle$$



$$\hat{S}_n = n_x \hat{S}_x + n_y \hat{S}_y + n_z \hat{S}_z \equiv \vec{n} \cdot \vec{S}$$

$$\hat{S}_n = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{i\varphi} \\ \sin \theta e^{-i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |\varepsilon\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\varphi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \hat{S}_n |\varepsilon\rangle = +\frac{\hbar}{2} |\varepsilon\rangle$$

représentation sur sphère de Bloch
Asymétrie pour système à 2 niveaux au spin 1/2



• état propre de S_z : pôle N ou S de cette sphère.

$$S_{z,\pm} : |+\rangle \leftrightarrow N \quad |-\rangle \leftrightarrow S \quad (\rightarrow on retrouve l'intuition de la mesure d'un moment cinétique \rightarrow son mouvement selon l'apport en boîte exactement -i)$$

II. Couplage à un champ magnétique

• Relation $\vec{\mu} = \gamma \vec{j}$ factor gyro magnétique.

$$\begin{matrix} \text{(magnétique)} \\ \text{(kinétique)} \end{matrix}$$

• hypothèse: reste valable pour un spin

$$\gamma = \text{facteur gyro magnétique} \quad \hookrightarrow \text{caractérise l'objet considéré (particule, liaison chimique, etc...)}$$

Comment mesurer γ ?

$$\bullet \text{ Couplage à } \vec{B} : H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (\text{couplage Zeeman})$$

→ autre méthode: Stern et Gerlach, déviation de 3% (ici au tableau de Rabi; introduit initialement par Rabi dans cette mesure).

$$\bullet \text{ Précession de Larmor} \quad \text{Spin } \frac{1}{2} : H = -\frac{\hbar}{2} \gamma B \vec{\sigma} \equiv -\hbar \omega B \vec{\sigma} \quad (\text{avec } \vec{\sigma} \parallel \vec{B})$$

→ pas n'est pas la preuve de l'existence de l'onde.
(relé au angle de Bohr).

• Particule soumise uniquement à \vec{B} :

$$\left(|+\rangle(t) \right) = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle \quad \hat{t} = 0$$

$$\hookrightarrow |\psi(t)\rangle = \alpha \exp(-i\frac{\hbar\omega}{2}t) |+\rangle + \beta \exp(i\frac{\hbar\omega}{2}t) |-\rangle = \begin{pmatrix} \alpha e^{-i\frac{\hbar\omega}{2}t} \\ \beta e^{i\frac{\hbar\omega}{2}t} \end{pmatrix}$$

$$\text{avec } \hbar \omega = \vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

$$\begin{aligned} \langle \mu_B | \langle \psi(t) | \hat{\mu}_x | \psi(t) \rangle \rangle &= \gamma \frac{1}{2} \langle \psi(t) | \hat{\sigma}_x | \psi(t) \rangle \\ &= \mu_0 (1 + \beta^2 - 1/\beta^2) \\ &= \mu_0 (t=0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \mu_x(t) | \langle \psi(t) | \hat{\mu}_x | \psi(t) \rangle \rangle &= \gamma \frac{1}{2} \langle \psi(t) | \hat{\sigma}_x | \psi(t) \rangle \quad T_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \gamma \frac{1}{2} \left(\alpha^* \beta e^{i\omega t} + \beta^* \alpha e^{-i\omega t} \right) \\ &= \gamma \hbar \text{Re}(\alpha^* \beta e^{-i\omega t}) = \gamma \hbar |\alpha| \beta \cos(\omega t + \varphi) \\ \langle \mu_y(t) | \langle \psi(t) | \hat{\mu}_y | \psi(t) \rangle \rangle &= \gamma \hbar \text{Im}(\alpha^* \beta e^{-i\omega t}) = \gamma \hbar |\alpha| \beta \sin(\omega t + \varphi) \end{aligned}$$

\Rightarrow on retrouve une precession



Polarisation de Larmor $\omega_L = \gamma B$
pour $1e^-$: $\gamma = -\frac{e}{mc}$, $\mu_x = \pm \frac{e}{2mc} = \mu_B \equiv$ magneton de Bohr. } excellent accord théorie/exp \rightarrow électrodynamique quantique

proton: $\gamma \approx 2.73 \frac{e}{mp}$, $\mu_x = 2.73 \mu_N$ où $\mu_N \equiv$ magneton nucléaire } accord théorie/exp \rightarrow électrodynamique quantique à 10%

neutron: $\gamma \approx 1.91 \frac{e}{mp}$

II. Expérience de Stern-Gerlach

De B_z qui se couple au spin des atomes

\rightarrow description de la trajectoire des atomes qui dépend du spin.

\rightarrow degrés de liberté orbitale + spin.

espace de l'effilant: $E_{orbital} \otimes E_{spin}$

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= \psi_{+}(\vec{r}, t) |+\rangle + \psi_{-}(\vec{r}, t) |-\rangle \\ |\psi\rangle &= |\psi_r\rangle \otimes |+\rangle + |\psi_\theta\rangle \otimes |-\rangle \\ \psi &= \begin{pmatrix} \psi_r(\vec{r}, t) \\ \psi_\theta(\vec{r}, t) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \text{écartures équivalentes} \\ \text{orbite} \otimes \text{spin.} \end{array} \right\}$$

$$\rightarrow H = \left(\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \otimes \mathbb{1} - (\hat{\vec{1}} \otimes \hat{\vec{B}}(\vec{r})) \quad \left. \begin{array}{l} \text{écriture un peu fausse par bien montrer que } \hat{\vec{1}} \text{ agit sur le spin} \\ \text{et } \frac{p^2}{2m} + V \text{ agit sur l'atome} \end{array} \right)$$

$$\hat{\vec{1}} = \begin{pmatrix} (+|W\rangle) & (+|W\rangle) \\ (-|W\rangle) & (-|W\rangle) \end{pmatrix}$$

Schrödinger:

$$\rightarrow i\hbar \partial_t \psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi_r(\vec{r}, t) + \underbrace{\langle +|W|-\rangle}_{\sim 0} \psi_r(\vec{r}, t) + \underbrace{\langle -|W|-\rangle}_{\sim 0} \psi_r(\vec{r}, t)$$

si $B_x \sim B_y$ le long de la trajectoire ($\vec{B} \parallel \vec{z}$) alors $\langle +|W|-\rangle = \langle -|W|+\rangle = 0$ car $B \sim \sqrt{2}$

$$\rightarrow i\hbar \partial_t \psi_r(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi_r(\vec{r}, t) + \underbrace{\langle -|W|-\rangle}_{\sim 0} \psi_r(\vec{r}, t) - \underbrace{\langle +|W|+\rangle}_{\sim 0} \text{ car } W \propto \sigma_z$$

$$\bullet \frac{d}{dt} \langle \lambda^\pm \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{p}_\pm \rangle \quad \left. \begin{array}{l} \text{application du théorème d'Erlangen} \end{array} \right\}$$

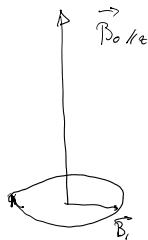
$$\frac{d}{dt} \langle p_x, \pm \rangle = \frac{d}{dt} \langle p_y, \pm \rangle = 0$$

$$\frac{d}{dt} \langle p_z, \pm \rangle = \pm \mu_0 \frac{\partial}{\partial z} B_z$$

Stern-Gerlach \rightarrow mesure de $\Delta z \leftrightarrow$ facteur γ

IV - Résonance magnétique

spin $\frac{1}{2}$ + \vec{B}_0 statique + \vec{B}_1 tournant dans plan xy



Si spin $\frac{1}{2}$, on peut poser $|\psi(t)\rangle = a_+(t)|\uparrow\rangle + a_-(t)|\downarrow\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} a_+(t) \\ a_-(t) \end{pmatrix}$

$$\mathcal{H} = -\mu_0 \vec{B} \cdot \vec{B} = -\begin{pmatrix} \mu_0 B_0 & \mu_0 B_1 (\cos \omega t - i \sin \omega t) \\ \mu_0 B_1 (\cos \omega t + i \sin \omega t) & -\mu_0 B_0 \end{pmatrix} = \text{partie diagonale constante et grande} + \text{partie off-diagonale dep de t et petites}$$

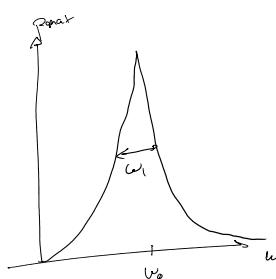
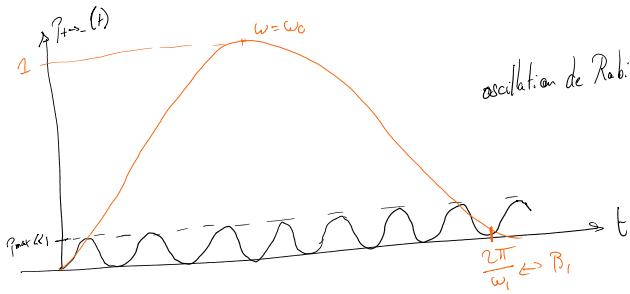
= comme pour système à 2 niveaux ! (oscillation de Rabi)

→ oscillations de Rabi; cf Ham/Horlich + NH₃ + E(t)
(LASER)

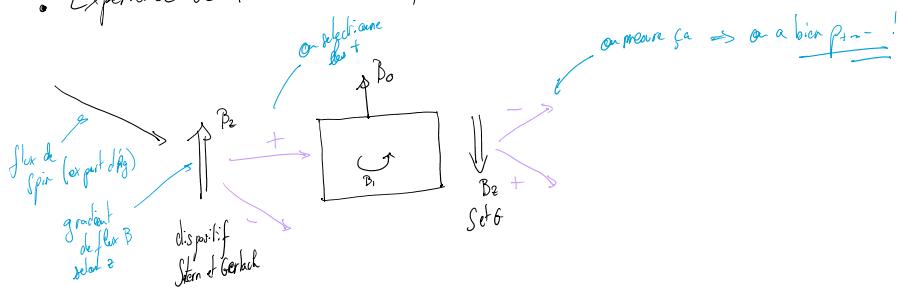
$$P_{+-}(t) = \frac{\omega_1^2}{\Delta^2} \sin^2 \frac{\Delta t}{2} \quad \text{avec} \quad \frac{\hbar \omega_0}{2} = \mu_0 B_0$$

$$\frac{\hbar \omega_1}{2} = \mu_0 B_1$$

$$\Delta^2 = (\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2$$



- Expérience de Rabi: mesure de $P_{+-}(t)$



- mesure de ω_0 donc de γ précision $10^3 \times$ supérieur à Stern et Gerlach

- expérience de 1939 → prix Nobel 1944 donc très court!

Chapitre 6: États intriqués

13 November 2024 15:51

- 2 degrés de liberté A et B $\Leftrightarrow \mathcal{E} = \mathcal{E}_A \otimes \mathcal{E}_B$
 état factorisé $|AB\rangle = |A\rangle \otimes |B\rangle \rightarrow$ on connaît l'état $|A\rangle$ de A
 $|B\rangle$ de B

- Ce n'est pas le cas en général:

Somme d'états factorisés : $|AB\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|A_1B_1\rangle + |A_2B_2\rangle)$

↪ forte corrélation de mesures sur A et B

proba	$\frac{1}{2}$	$ A_1\rangle$	$ B_1\rangle$
	$\frac{1}{2}$	$ A_2\rangle$	$ B_2\rangle$
0		$ A_1\rangle$	$ B_2\rangle$
0		$ A_2\rangle$	$ B_1\rangle$

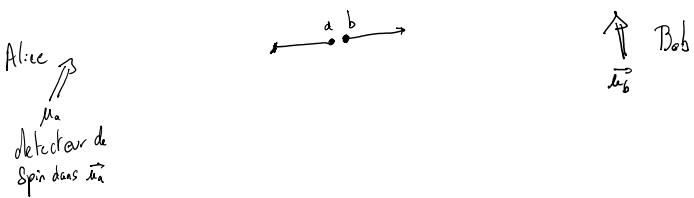
on va étudier 2 systèmes :

- Aspect et interaction entre 2 particules
- Décohérence et inévitabilité A = part B = environnement

I. Paradoxe EPR

2 particules de spin $1/2$ dans état "singulet"

$$|\psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|a, +z\rangle \otimes |b, -z\rangle - |a, -z\rangle \otimes |b, +z\rangle)$$



- A et B choisissent 1 direction $\vec{\mu}_a = \vec{\mu}_b = \hat{e}_z$

proba	$\frac{1}{2}$	$+k/2$	$-k/2$
	$\frac{1}{2}$	$-k/2$	$+k/2$

- A et B choisissent $\vec{\mu}_a = \vec{\mu}_b = \hat{e}_x$

→ mesure spin $\hat{I}_{zx} = \pm \frac{k}{2}$ selon $| \pm_z \rangle$

$$|+z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+x\rangle + |-x\rangle)$$

$$|-z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (-|+x\rangle + |-x\rangle)$$

$$\begin{aligned} |+z\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ |-z\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 |\psi_s\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2} \left[(|+\alpha\rangle + |-\alpha\rangle) \otimes (-|+\alpha\rangle + |-\alpha\rangle) - (-|+\alpha\rangle + |-\alpha\rangle) \otimes (|+\alpha\rangle + |-\alpha\rangle) \right] \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2} \left[-|\cancel{+},+\rangle + |+,-\rangle - |-,+\rangle + |,-,\rangle - (-|\cancel{+},+\rangle - |+,-\rangle + |+,+\rangle + |,-,\rangle) \right] \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cancel{\frac{1}{2}} \left(|+\alpha\rangle \otimes |-\alpha\rangle - |-\alpha\rangle \otimes |+\alpha\rangle \right)
 \end{aligned}$$

→ même résultat de mesure selon α que selon β

→ ne dépend que de $\vec{\mu}_a \cdot \vec{\mu}_b$

II - Inégalité de Bell

Idée: il existe 1 théorie avec variables cachées →

$$A(\lambda, \mu_a) \rightarrow \pm \frac{k}{2} \quad \text{avec loi de distribution } P(\lambda)$$

$$B(\lambda, \mu_b) \rightarrow \pm \frac{k}{2}$$

Corrélation $E(\vec{\mu}_a, \vec{\mu}_b) = \frac{4}{k^2}$ { mesure de spin à $\vec{\mu}_a$ fixé, mesure à $\vec{\mu}_b$ fixé }

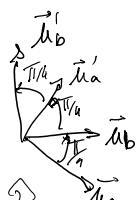
$$\Rightarrow |E| \leq 1$$

Si variables λ existent : $E(\vec{\mu}_a, \vec{\mu}_b) = \int d\lambda P(\lambda) A(\lambda, \vec{\mu}_a) B(\lambda, \vec{\mu}_b)$ avec $\int d\lambda P(\lambda) = 1 ; P(\lambda) \geq 0$.

Théorème de Bell:

1. Si λ existe

$$|E(\vec{\mu}_a, \vec{\mu}_b) + E(\vec{\mu}'_a, \vec{\mu}'_b) + E(\vec{\mu}_a, \vec{\mu}'_b) - E(\vec{\mu}'_a, \vec{\mu}'_b)| \leq \bar{z}$$



2. Peut être ≥ 2 en IQ

$$\hookrightarrow E(\vec{\mu}_a, \vec{\mu}_b) = -\vec{\mu}_a \cdot \vec{\mu}_b$$

Avec la config $\frac{1}{2}$ entre (μ_a, μ_b) , $\frac{1}{2}$ entre (μ_b, μ'_a) , $\frac{1}{2}$ entre (μ'_a, μ'_b)

$$1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad \Rightarrow 2 > 2.$$

Avec la config $\prod_{\frac{1}{2}}$ entre (μ_a, μ_b) , $\prod_{\frac{1}{2}} (\mu_b, \mu_a')$, $\prod_{\frac{1}{2}}$ autre (μ_a', μ_b')

$$\text{on trouve } -\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{2}} - \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) = -2\sqrt{2} > 2$$

« Justification » du signe « \pm »

$$\begin{aligned} S(\lambda) &= A(\lambda, \mu_a) B(\lambda, \mu_b) + A(\lambda, \mu_a) B(\lambda, \mu_b') + A(\lambda, \mu_a') B(\lambda, \mu_b') - A(\lambda, \mu_a') B(\lambda, \mu_b) \\ &= A(\lambda, \mu_a) \left(B(\lambda, \mu_b) + B(\lambda, \mu_b') \right) \\ &+ A(\lambda, \mu_a') \left(B(\lambda, \mu_b) - B(\lambda, \mu_b') \right) \end{aligned}$$

$$B(\lambda, \mu_b) = \pm \frac{\hbar}{2} = B(\lambda, \mu_b')$$

$$\Rightarrow \text{ si } B(\lambda, \mu_b) = B(\lambda, \mu_b') \quad S(\lambda) = \pm \frac{\hbar^2}{2}$$

$$B(\lambda, \mu_b) = -B(\lambda, \mu_b') \quad S(\lambda) = \mp \frac{\hbar^2}{2}$$

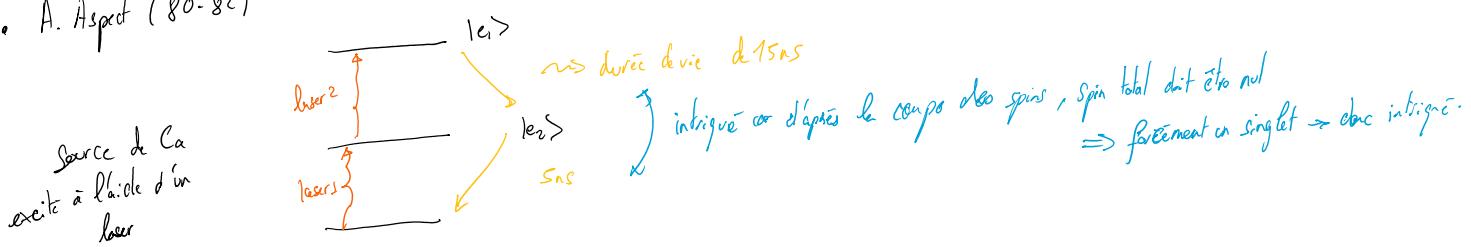
$$|\leq \int d\lambda P(\lambda) \cdot \frac{|\hbar|^2}{2} \frac{h}{\lambda^2} = 2$$

III Experiences d'Alain Aspect

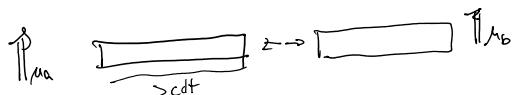
photons plutôt que des spins $\frac{1}{2}$
analogie des états spins $|\pm z\rangle$: polarisation linéaire $|+\rangle \propto |z\rangle$

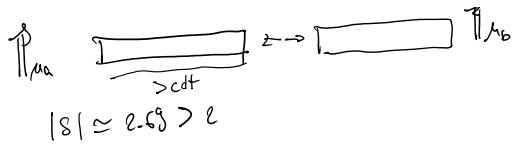
$$\text{état intrigué : } |\pm \pi/4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle \pm |-\rangle \right)$$

A. Aspect (80-82)



Source d'états à 2 photons dans 1 état intrigué
de quantité de mouvement nulle $\Rightarrow \vec{p}_a = -\vec{p}_b$





IV. Retour sur la notion d'intrication

Comment prédire les mesures sur 1 état intriqué

- A et B $|\Psi_{AB}\rangle \in \mathcal{E}_A \otimes \mathcal{E}_B$

si l'état de la particule A est 1 état pur $|\Psi_A\rangle \in \mathcal{E}_A$
 \rightarrow information maximale sur A

sinon : information incomplète \rightarrow information statistique.

- Jusqu'ici on décrivait A par $|\Psi_A\rangle$ défini à 1 phase près
 $\rightarrow \langle \Psi_A | O_A | \Psi_A \rangle$

- On peut remplacer cette description par $P_{\Psi_A} = |\Psi_A\rangle \langle \Psi_A|$ indép de phase de $|\Psi_A\rangle$

$$\begin{aligned} \text{et } \langle O_A \rangle &= \langle \Psi_A | O_A | \Psi_A \rangle \\ &= \sum_m \langle \Psi_A | O_A | m \rangle \langle m | O_A | \Psi_A \rangle \\ &= \sum_m \langle m | \Psi_A \rangle \langle \Psi_A | O_A | m \rangle \\ &= \text{Tr}_{\mathcal{E}_A} (P_{\Psi_A} O_A) \end{aligned}$$

- Si on a 1 information statistique sur A

$$\sum_a p_a \text{Tr} (P_{\Psi_A} O_A) = \text{Tr} \left(\sum_a p_a O_A \right)$$

$f = \sum_a p_a \tilde{P}_{\Psi_A} = \text{opérateur densité qui décrit un mélange statistique.}$
 \hookrightarrow ici d'origine intrication mais qui pourrait être d'origine thermique (?)

- P_{Ψ_A} est hermitien $\Rightarrow f$ est hermitien.

$$\cdot \text{Tr } f = \underbrace{\sum_a p_a}_{\text{Tr } P_{\Psi_A}} = 1$$

- $\text{Tr } \rho = \sum_{a=1}^{\infty} p_a \tilde{\text{Tr}} P_a = 1$
- $\langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0 = \sum p_a |\langle \psi | \psi_a \rangle|^2 \geq 0$
- Système A est dans un état pur $|A\rangle \Leftrightarrow \begin{cases} \rho^2 = \rho \\ \text{Tr } \rho = 1 \end{cases} \quad \left\{ \begin{array}{l} \rho = |A\rangle \langle A| \end{array} \right.$

Exemple de spin $\frac{1}{2}$ (système quantique le plus simple)
système à 2 niveaux

$$\rho = a|1\rangle + \vec{b} \cdot \vec{\sigma} \quad \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{Or } \text{Tr } \rho = 1 \text{ et } \text{Tr } \vec{\sigma} = 0 \text{ donc } a = \frac{1}{2}$$

$$\rightarrow \rho = \frac{1}{2}|1\rangle + \frac{1}{2}\vec{b} \cdot \vec{\sigma}$$

par raison de symétrie je choisis "c'est plus joli"

$$A|1\rangle \quad \langle \psi | \rho | \psi \rangle = 0$$

$$\Rightarrow \rho \text{ a 2 valeurs propres } \lambda_+, \lambda_- \geq 0$$

$$\text{Tr } \rho = 1 \Rightarrow \lambda_+ + \lambda_- = 1$$

$$\Rightarrow \lambda_- = 1 - \lambda_+$$

$$\Rightarrow \det \rho_- = \lambda_+ \lambda_- = \lambda_+ (1 - \lambda_+) \in [0, \frac{1}{4}] \text{ car } 0 \leq \lambda_+ \leq 1$$

$$\Rightarrow \det \rho = \det \frac{1}{2} \begin{bmatrix} b_x + 1 & b_x - i b_y \\ b_x + i b_y & 1 - b_x \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{4} \left(1 - \underbrace{(b_x^2 + b_y^2 + b_z^2)}_{\|\vec{b}\|^2} \right)$$

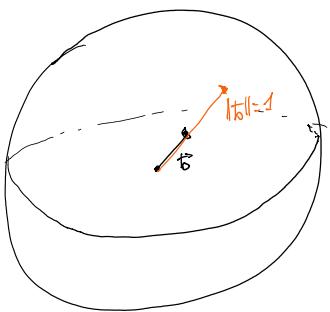
$$\Rightarrow \|\vec{b}\| \leq 1$$

$\|\vec{b}\|=1$ si $\det \rho = 0 \Leftarrow$ spin $\frac{1}{2}$ dans un état pur

$$\text{car } \rho^2 = \rho$$

$$\Rightarrow (\det \rho)^2 = \det \rho$$

$\|\vec{b}\| \leq 1 \Leftrightarrow$ sphère de Bloch



$\Rightarrow \|\vec{b}\| = 1 \rightarrow \text{état pur} \rightarrow \text{sphère de Bloch}$
 $\Rightarrow \|\vec{b}\| < 1 \rightarrow \text{on "perd" de l'info sur } \vec{b} \rightarrow \text{notion de décohérence}$
 $\rightarrow \text{on a qu'une info statistique de } \underline{\underline{b}}$

- On vérifie $\langle \hat{S}_i \rangle = \text{Tr}(\rho \hat{S}_i)$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\hbar}{2} \text{Tr} \left(\underbrace{\frac{1}{2} (1 + \vec{b} \cdot \vec{\sigma})}_{\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_i = 1} \vec{\sigma}_i \right) \\
 &\quad \vec{\sigma}_{i,j} \cdot \vec{\sigma}_i = \pm \sqrt{k} \\
 &= \frac{\hbar}{2} b_i
 \end{aligned}$$

\Rightarrow généralise la construction de la sphère de Bloch
 $\langle \vec{S} \rangle = \frac{\hbar}{2} \vec{b}$

\vec{b} contient 2 types d'informations:

- $\|\vec{b}\|$: état pur ou mélange?
 \hookrightarrow peut-on trouver une direction pour 1 mesure de \vec{S} maximale?
- \rightarrow (de) cohérence de la matrice densité ρ
- \vec{b} : information sur la direction d'une telle mesure
- \rightarrow (de) phases de ρ .

Equation d'évolution de ρ ?

Système dans un état pur $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} \rho &= i\hbar \left(\frac{d}{dt} |\psi\rangle \langle\psi| + |\psi\rangle \left(i\hbar \frac{d}{dt} \langle\psi| \right) \right) \\
 &= H |\psi\rangle \langle\psi| - i\hbar \rho (\langle\psi| H)
 \end{aligned}$$

\hookrightarrow car $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \rightarrow -i\hbar \frac{d}{dt} \langle\psi| = H \langle\psi|$

Défaut $\rho = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha|$

$$+ \rho = \sum_{\alpha} p_{\alpha} [H, |\alpha\rangle\langle\alpha|] = [H, \rho]$$

Métrique $\rho = \frac{1}{2} \tau^a$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} \rho = \frac{1}{2} \rho_a [H, \rho_a] = [H, \rho]$$

Exemple: spin dans 1 champ B : $H = -\frac{\hbar}{2} \gamma \sigma_z B$

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar}{2} \gamma \sigma_z B, \underbrace{\frac{1}{2} (\mathbb{I} + \vec{\sigma} \cdot \vec{B})}_{\rho} \right]$$

$$= -\frac{\gamma B}{4i} \left[\sigma_z, b_x \sigma_x + b_y \sigma_y \right]$$

$$= -\gamma B (b_x \sigma_y - b_y \sigma_x)$$

$$\Rightarrow \frac{db_x}{dt} = \gamma B b_y; \quad \frac{db_y}{dt} = -\gamma B b_x; \quad \frac{db_z}{dt} = 0 \Rightarrow \text{precession d' Larmor}$$

Si couplage \rightarrow décohérence $\| b \|^2$ avec t

