

Mécanique quantique – L3 FIP

Corrigé du TD 2

1 Matrices de Pauli

1. Les matrices de Pauli forment (avec la matrice \mathbb{I}) une **base de l'espace des opérateurs** (sur un espace de dimension 2), qui est de dimension $2 \times 2 = 4$ ($= 3 + 1$ avec \mathbb{I}).

Tout hamiltonien \hat{H} peut notamment s'écrire sous la forme :

$$\hat{H} = \lambda \mathbb{I} - \gamma \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} \cdot \mathbf{B}, \quad (1)$$

où $\lambda \in \mathbb{R}$ et \mathbf{B} est un champ magnétique de composantes $(B_x, B_y, B_z) \in \mathbb{R}^3$.

Le premier terme fixe l'origine des énergies, le second correspond à l'interaction d'un spin 1/2 avec un champ magnétique (cf le cours d'A. Bilal).

γ est le **facteur gyromagnétique** (< 0 pour un électron).

C'est pour cela que la dynamique d'un spin 1/2 dans un champ \mathbf{B} est aussi importante. En pratique, elle décrit tous les systèmes à deux niveaux évoluant sous l'effet d'un hamiltonien indépendant du temps.

2. Oui, elles sont toutes **hermitiennes** : $\hat{\sigma}_x = \hat{\sigma}_x^\dagger \dots$
Elles peuvent donc être des **observables**, par exemple (à $\hbar/2$ près) les 3 composantes d'un spin 1/2.
3. On peut calculer, à partir de leurs formes dans la base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$:

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = \dots = 2i\hat{\sigma}_z \quad (2)$$

$$[\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] = 2i\hat{\sigma}_x \quad (3)$$

$$[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y. \quad (4)$$

Si on passe aux opérateurs de spin $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x \dots$, on trouve :

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z, \quad (5)$$

ce qui est **caractéristique de tous les opérateurs de moment cinétique**, que ce soit le moment cinétique orbital $\hat{\mathbf{L}}$, celui de spin $\hat{\mathbf{S}}$, le moment cinétique total $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} \dots$ (cf le cours sur les moments cinétiques, a priori au second semestre).

4. $\hat{\sigma}_z$ a évidemment les valeurs propres $+1$ et -1 .

On note $|+\rangle_z$ l'état propre associé à $+1$ et $|-\rangle_z$ celui associé à -1 .

On a en fait $|+\rangle_z = |1\rangle$ et $|-\rangle_z = |2\rangle$. C'est une **convention** : de la même façon qu'on utilise l'axe (Oz) comme référence en coordonnées cylindriques ou sphériques, on utilise a priori les états propres de $\hat{\sigma}_z$ comme états de base pour décrire l'espace des états, et s'il y a un champ magnétique statique, on le prendra a priori selon l'axe (Oz) .

On se contente d'ailleurs d'ailleurs habituellement de noter $|+\rangle = |+\rangle_z$ et $|-\rangle = |-\rangle_z$:
si on ne précise pas l'axe, c'est (Oz) !

On calcule les valeurs propres de $\hat{\sigma}_x$:

$$\det(\hat{\sigma}_x - \lambda \mathbb{I}) = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1. \quad (6)$$

$\hat{\sigma}_x$ a donc (sans surprise) les mêmes valeurs propres que $\hat{\sigma}_z$ et on trouve les états propres suivants (normalisés, à un facteur global de phase près) :

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) \quad (7)$$

$$|-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle). \quad (8)$$

Pour trouver par exemple l'expression de $|+\rangle_x$, on démarre avec $|+\rangle_x = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$ et on utilise la forme matricielle de $\hat{\sigma}_x$:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (9)$$

La première égalité provient du produit matriciel, la seconde de la définition de l'état propre (avec la valeur propre 1).

On trouve donc $\alpha = \beta$ et on termine avec le facteur $1/\sqrt{2}$, qui permet de normaliser le ket (on pourrait aussi ajouter une phase globale $e^{i\varphi}$).

Les deux équations sont équivalentes, précisément parce qu'on a une valeur propre de l'opérateur. N'importe quelle autre valeur que 1 ou -1 ne marcherait pas.

On procède de même pour tous les autres états propres, et on trouve également :

$$|+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + i|-\rangle) \quad (10)$$

$$|-\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - i|-\rangle). \quad (11)$$

5. Pour déterminer les probabilités de mesurer ± 1 quand on mesure $\hat{\sigma}_i$, il faut écrire l'état $|\psi\rangle$ sur la base des états propres de $\hat{\sigma}_i$.

Pour $\hat{\sigma}_z$:

C'est facile, c'est déjà écrit sous la bonne forme.

On trouve $p_+ = |\alpha|^2$ et $p_- = |\beta|^2$, et on a bien $p_+ + p_- = 1$.

Pour $\hat{\sigma}_x$:

Il faut décomposer $|\psi\rangle$ sur $|+\rangle_x$ et $|-\rangle_x$ et donc en fait inverser les relations de passage entre les bases propres de $\hat{\sigma}_z$ et $\hat{\sigma}_x$.

Partant de (7) et (8), on trouve de façon très symétrique :

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_x + |-\rangle_x) \quad (12)$$

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_x - |-\rangle_x). \quad (13)$$

On a alors :

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha(|+\rangle_x + |-\rangle_x) + \beta(|+\rangle_x - |-\rangle_x)) \quad (14)$$

$$|\psi\rangle = \frac{\alpha + \beta}{\sqrt{2}}|+\rangle_x + \frac{\alpha - \beta}{\sqrt{2}}|-\rangle_x \quad (15)$$

$$\Rightarrow p_+ = \frac{|\alpha + \beta|^2}{2} \text{ et } p_- = \frac{|\alpha - \beta|^2}{2}, \quad (16)$$

avec la somme de ces probabilités qui vaut toujours 1 (même si c'est moins évident).

Pour $\hat{\sigma}_y$:

Il faut de la même façon décomposer $|\psi\rangle$ sur $|+\rangle_y$ et $|-\rangle_y$:

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_y + |-\rangle_y) \quad (17)$$

$$|-\rangle = \frac{1}{i\sqrt{2}}(|+\rangle_y - |-\rangle_y). \quad (18)$$

On trouve alors en procédant de la même façon :

$$p_+ = \frac{|\alpha - i\beta|^2}{2} \text{ et } p_- = \frac{|\alpha + i\beta|^2}{2}, \quad (19)$$

avec (toujours) la somme de ces probabilités qui vaut 1.

6. Premier montage

Le système est initialement dans un état $|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$. Le dispositif de Stern et Gerlach (SG) mesure $\hat{\sigma}_z$ et on ne garde que les atomes dans l'état $|+\rangle$. Une deuxième mesure de $\hat{\sigma}_z$ redonne donc +, avec une probabilité 1.

Deuxième montage

Après le premier SG, $|\psi\rangle = |+\rangle$. On a donc 50% des atomes mesurés dans $|+\rangle_x$ (jet du haut) et 50% dans $|-\rangle_x$ (jet du bas).

Troisième montage

Après les deux premiers SG, on ne garde que le jet du haut. On a donc **polarisé** les atomes dans $|+\rangle_x$. Donc, si on mesure de nouveau $\hat{\sigma}_z$, on a 50% de chances de mesurer +, et 50% de chances de mesurer -.

La **mesure intermédiaire** de $\hat{\sigma}_x$ a donc **perturbé le système**. Ce n'est pas forcément le cas pour toute mesure : ici, elle perturbe car $\hat{\sigma}_x$ est un **opérateur qui ne commute pas avec $\hat{\sigma}_z$** . Si on mesurait \hat{O} tel que $[\hat{O}, \hat{\sigma}_z] = 0$, alors les deux opérateurs seraient **diagonalisables simultanément** et la mesure intermédiaire de \hat{O} passerait inaperçue.

7. La différence entre les deux ensembles n'apparaît pas si on ne mesure que $\hat{\sigma}_x$: dans les deux cas, on obtient 50% de + et 50% de -.

Par contre, si on mesure $\hat{\sigma}_z$, dans le premier cas, on trouve $p_+ = 1$, alors qu'avec le mélange statistique d'états $|+\rangle_x$ et $|-\rangle_x$, on a $p_+ = p_- = 1/2$ (vérifiez-le!).

2 L'effet Zénon quantique

1. On a $\hat{H}_0 = \hbar\Omega|1\rangle\langle 2| + \hbar\Omega^*|2\rangle\langle 1|$. Supposons que $\Omega = \Omega_0 e^{i\phi}$ (cas général), avec $\Omega_0 \in \mathbb{R}$. On peut alors changer un des deux états de base par un facteur de phase (on sait qu'on a le droit de faire cela) et réécrire \hat{H}_0 dans cette base, par exemple :

$$|2\rangle \rightarrow |2'\rangle = |2\rangle e^{i\phi} \implies \hat{H}_0 = \hbar\Omega_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (20)$$

On peut donc toujours se ramener au cas où Ω est réel.

Attention, dans le cas général d'un espace à N dimensions, on peut facilement faire en sorte qu'un état ait des éléments non-diagonaux réels avec tous les autres (en ajustant la phase de ces états les uns après les autres), mais par contre les éléments non-diagonaux restants (entre tous les autres états) ne le sont pas nécessairement et on ne peut plus toucher à la phase des états correspondants !

Par exemple, pour 3 niveaux, on peut avoir :

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & \hbar\Omega_{12} & \hbar\Omega_{13} \\ \hbar\Omega_{12} & E_2 & \hbar\Omega_{23} \\ \hbar\Omega_{13} & \hbar\Omega_{32} & E_3 \end{pmatrix}, \quad (21)$$

avec $E_1, E_2, E_3, \Omega_{12}$ et $\Omega_{13} \in \mathbb{R}$, **mais pas nécessairement** $\Omega_{23} (= \Omega_{32}^*$ par contre).

En effet, en démarrant avec un hamiltonien quelconque, on a a priori $\Omega_{12}, \Omega_{13}, \Omega_{12} \in \mathbb{C}$. En ajustant la phase de $|2\rangle$, on peut faire en sorte que $\Omega_{12} \in \mathbb{R}$. Puis, en ajustant celle de $|3\rangle$, on obtient $\Omega_{13} \in \mathbb{R}$. Mais on ne peut plus ajuster aucune phase pour rendre Ω_{23} réel s'il ne l'est pas.

2. Les équations d'évolution temporelle de $a(t)$ et $b(t)$ s'écrivent sous forme matricielle :

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} = \hbar\Omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \hbar\Omega_0 \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}.$$

3. Avec la condition initiale $|\psi(t=0)\rangle = |1\rangle$, on trouve :

$$|\psi(t)\rangle = \cos(\Omega_0 t)|1\rangle - i \sin(\Omega_0 t)|2\rangle.$$

On trouve un résultat important : quand deux états sont couplés, le système effectue une **oscillation de Rabi** (Prix Nobel 1944) entre les deux états. Quand les deux états sont **dégénérés** (de même énergie, comme ici), l'oscillation de Rabi est **complète** : le système peut basculer dans un état où on le mesure avec certitude dans l'état $|2\rangle$ (ici, par exemple, pour $\Omega_0 t = \pi/2$).

On peut employer différentes méthodes pour trouver ce résultat : redériver l'équation sur \dot{a} pour en obtenir une sur \ddot{a} dans laquelle on réinjecte celle sur \dot{b} , utiliser le complexe $z = a + ib \dots$ Il faut aussi bien écrire les conditions initiales. N'hésitez pas à faire le calcul de ces différentes façons.

4. \hat{H}_0 se met sous la forme $\hat{H}_0 = \hbar\Omega_0 \hat{\sigma}_x$, dont on a déjà vu qu'il a pour états et énergies propres :

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle), \text{ avec } E_+ = +\hbar\Omega_0 \quad (22)$$

$$|-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - |-\rangle), \text{ avec } E_- = -\hbar\Omega_0. \quad (23)$$

On note très souvent les états ainsi, même si, une fois de plus, l'hamiltonien n'a peut-être rien à voir en fait avec un spin.

A noter que $|+\rangle_x$ et $|-\rangle_x$ sont **états propres** de \hat{H}_0 **quelle que soit la valeur de Ω_0** , y compris d'ailleurs pour $\Omega_0 = 0$. On verra au TD suivant que le paramètre important est Ω_0/Δ où $\hbar\Delta$ est la différence d'énergie entre les deux niveaux (différence des éléments de matrice diagonaux du hamiltonien). Alors forcément, quand $\Delta = 0...$

En d'autres termes, $|+\rangle_x$ et $|-\rangle_x$ sont **des états de base tout aussi pertinents** que $|+\rangle$ et $|-\rangle$ pour $\Omega_0 = 0$ et le restent pour $\Omega_0 \neq 0$ (alors que ce n'est plus le cas de $|+\rangle$ et $|-\rangle$).

On peut maintenant **déterminer l'évolution temporelle** du système en :

- (a) écrivant l'état de départ sur la base $\{|+\rangle_x, |-\rangle_x\}$
- (b) laissant les deux composantes évoluer selon $\pm\Omega_0$
- (c) réécrivant à la fin l'état final sur la base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$.

Ici, l'enchaînement est le suivant :

$$|\psi(t=0)\rangle = |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_x + |-\rangle_x) \quad (24)$$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_x e^{-i\Omega_0 t} + |-\rangle_x e^{i\Omega_0 t}) \quad (25)$$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \frac{1}{2} \{ (|1\rangle + |2\rangle) e^{-i\Omega_0 t} + (|1\rangle - |2\rangle) e^{i\Omega_0 t} \} \quad (26)$$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \frac{1}{2} \{ |1\rangle (e^{-i\Omega_0 t} + e^{i\Omega_0 t}) + |2\rangle (e^{-i\Omega_0 t} - e^{i\Omega_0 t}) \} \quad (27)$$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \cos(\Omega_0 t) |1\rangle - i \sin(\Omega_0 t) |2\rangle. \quad (28)$$

5. La probabilité de mesurer le système dans l'état $|2\rangle$ au temps t est alors :

$$P_2 = |\langle 2 | \psi(t) \rangle|^2 = \sin^2(\Omega_0 t).$$

6. Pour $\Omega_0 t = \pi/2 + k\pi$ (avec k entier naturel), $P_2 = 1$: le système peut alors être **détecté avec certitude** dans l'état $|2\rangle$. On note donc $T = \pi/2\Omega_0$.
7. La probabilité de transition $1 \rightarrow 2$ (ou $2 \rightarrow 1$) est ici sur une durée $T/2$:

$$p_{1 \rightarrow 2} = p_{2 \rightarrow 1} = \frac{1}{2}.$$

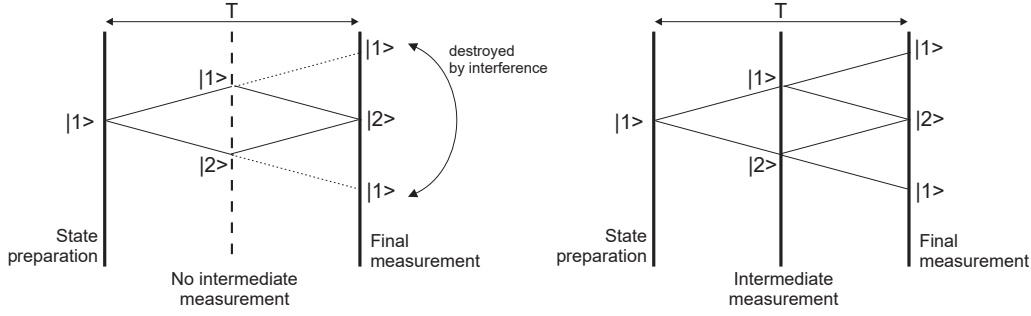


FIGURE 1 – Une remise à zéro (par projection sur l'état propre associé au résultat de la mesure) à $T/2$ diminue l'effet de l'oscillation de Rabi. Si aucune mesure n'est réalisée, l'oscillation de Rabi complète détruit par contre totalement la composante de l'état sur 1.

Ici, on mesure toujours la même observable, mais contrairement à l'expérience de Stern et Gerlach, cette observable ne commute pas avec l'hamiltonien, si bien qu'une fois la mesure intermédiaire effectuée, le système évolue encore et peut donner un résultat différent lors de la seconde mesure. On a finalement :

$$P_{1 \rightarrow 2} = p_{1 \rightarrow 2} p_{2 \rightarrow 2} + p_{1 \rightarrow 1} p_{1 \rightarrow 2} = \frac{1}{2} \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{1}{2} = \frac{1}{2}.$$

Résultat à comparer à la probabilité unité qu'on obtiendrait si on n'effectuait pas de mesure au temps $T/2$. Dans ce cas, les **interférences** entre les chemins $1 \rightarrow 2 \rightarrow 2$ et $1 \rightarrow 1 \rightarrow 2$ augmentent la probabilité.

8. On s'intéresse maintenant au cas général. Sur un temps T/n , les probabilités de transition deviennent :

$$p_{1 \rightarrow 2} = p_{2 \rightarrow 1} = \sin^2 \left(\frac{\pi}{2n} \right) \text{ et } p_{1 \rightarrow 1} = p_{2 \rightarrow 2} = \cos^2 \left(\frac{\pi}{2n} \right).$$

Pour établir la formule demandée, il suffit alors de remarquer que $1 - P(k, n)$ représente simplement la probabilité que le système soit dans l'état $|1\rangle$ à $t_k = kT/n$.

9. Les $P(k, n)$ constituent en fait une suite arithmético-géométrique :

$$\begin{aligned} P(k+1, n) &= \cos^2 \left(\frac{\pi}{2n} \right) P(k, n) + \sin^2 \left(\frac{\pi}{2n} \right) (1 - P(k, n)) \\ P(k+1, n) &= \left(\cos^2 \left(\frac{\pi}{2n} \right) - \sin^2 \left(\frac{\pi}{2n} \right) \right) P(k, n) + \sin^2 \left(\frac{\pi}{2n} \right) \\ P(k+1, n) - \frac{1}{2} &= \cos \left(\frac{\pi}{n} \right) \left(P(k, n) - \frac{1}{2} \right) \\ \Rightarrow P(n, n) - \frac{1}{2} &= \cos^n \left(\frac{\pi}{n} \right) \left(P(0, n) - \frac{1}{2} \right) \\ P(n, n) &= \frac{1}{2} \left(1 - \cos^n \left(\frac{\pi}{n} \right) \right), \end{aligned}$$

en utilisant la condition initiale $P(0, n) = 0$.

n	$\frac{1}{2}[1 - \cos^n(\pi/n)]$	1 \rightarrow 2 transition	
		Predicted	Observed
1	1.0000	0.995	0.995
2	0.5000	0.497	0.500
4	0.3750	0.351	0.335
8	0.2346	0.201	0.194
16	0.1334	0.095	0.103
32	0.0716	0.034	0.013
64	0.0371	0.006	-0.006

FIGURE 2 – Rappel des résultats de l'expérience d'Itano *et al.*

10. L'accord est très bon, dans la limite de $\pm 2\%$, avec la troisième colonne.
11. On peut notamment prendre en compte la durée finie des $n - 1$ mesures intermédiaires effectuées. C'est effectivement le principal effet pris en compte pour raffiner le modèle (d'autres sortent du cadre de ce module). Avec une durée de mesure de 2,4 ms, on voit par exemple que pour $n = 16$, 15% du temps est consacré à ces séquences de mesure, ce qui peut expliquer en partie la baisse de $P(n, n)$. Cela dit, toujours pour $n = 16$, la probabilité finale est diminuée par un facteur 10...
12. Un développement limité donne dans la limite $n \rightarrow \infty$:

$$P(n, n) \simeq \frac{1}{2} \left(1 - \exp \frac{-\pi^2}{2n} \right).$$

13. Donc, si $n \rightarrow \infty$, $P(n, n) \rightarrow 0$ et le système tend à rester dans l'état $|1\rangle$: l'évolution semble gelée par l'observation.
Cet effet est appelé *effet Zénon quantique* par référence aux paradoxes de Zénon d'Élée, notamment celui sur l'impossibilité (apparente...) du mouvement.

Bibliographie :

W. M. Itano, D. J. Heinzen, J. J. Bollinger et D. J. Wineland, *Quantum Zeno effect*, Phys. Rev. A **41**, 2295 (1990).