TD 4 - SYSTÈMES À DEUX NIVEAUX

Qu'est qu'un système à deux niveaux ?

De façon générale, un état quantique peut être défini comme une superposition des états de base de l'espace de Hilbert $\{\phi_n\}_{n\in N}$, *i.e.*

$$|\varphi\rangle = \sum_n \alpha_n |\phi_n\rangle$$

Un système à deux niveaux correpond au cas $N = 2$: l'espace de Hilbert est de dimension 2 et tout état quantique est la superposition de 2 vecteurs :

$$|\varphi\rangle = \alpha_0|\phi_0\rangle + \alpha_1|\phi_1\rangle$$

Exemples de systèmes simples à deux niveaux :

- *La polarisation de la lumière :* tout état $|\varphi\rangle$ peut s'écrire $|\varphi\rangle = \alpha|V\rangle + \beta|H\rangle$, avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.
- *Le spin 1/2* avec comme vecteur de base le spin-up $|\uparrow\rangle$ et le spin-down $|\downarrow\rangle$.
- *Tout système qui peut se réduire à l'étude de ses deux premiers niveaux d'énergie, le niveau fondamental* $|g\rangle$ *et un niveau excité* $|e\rangle$. Tout état $|\varphi\rangle$ peut s'écrire $|\varphi\rangle = \alpha|g\rangle + \beta|e\rangle$. Dans ce TD, on va étudier le cas de la molécule d'ammoniac.

1. Généralités

1.1 $H = H_0 + V = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & W' \\ W & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & W' \\ W & E_1 \end{pmatrix}$.

Remarque : V est le terme de couplage. Sans couplage, *i.e.* $V = 0$, H est déjà diagonal avec comme vecteurs propres $|0\rangle/|1\rangle$ et valeurs propres E_0/E_1.

1.2 H est un hamiltonien, **donc** hermitien :

$$\overline{H}^T = H \Rightarrow \begin{pmatrix} E_0^* & W^* \\ W'^* & E_1^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & W' \\ W & E_1 \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow E_0$ et E_1 sont réels, W' est le conjugué de W.

1.3 $K = \begin{pmatrix} -\frac{\Delta}{2} & W^* \\ W & \frac{\Delta}{2} \end{pmatrix}$

1.4 Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur propre de $H \Rightarrow H|\varphi\rangle = E_\varphi|\varphi\rangle$. Pour un état quantique quelconque $|\alpha\rangle$, $\mathbb{1}|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$. Ainsi

$$K|\varphi\rangle = (H - E_m\mathbb{1})\,|\varphi\rangle = (E_\varphi - E_m)\,|\varphi\rangle$$

$\Leftrightarrow |\varphi\rangle$ est aussi un vecteur propre de K.

Remarque : on verra par la suite que ceci est équivalent à dire que le commutateur entre K et H est nul, *i.e.* $[H, K] = HK - KH = 0$.

1.5 On note $|\pm\rangle$ les vecteurs propres de H, $E_\pm$ les valeurs propres associées à H, $K_\pm$ les valeurs propres associées à K :

$$H|\pm\rangle = E_\pm|\pm\rangle = (E_m + K_\pm)\,|\pm\rangle$$

$\Rightarrow E_\pm = E_m + K_\pm$

1.6 Une énergie est définie à une constante près (c'est la différence de potentiel qui est importante). $\Rightarrow$ On prend $E_m = 0$, et donc $E_\pm = K_\pm$.

1.7 $K = \begin{pmatrix} -\frac{\Delta}{2} & W^* \\ W & \frac{\Delta}{2} \end{pmatrix}$ avec $K|\pm\rangle = K_\pm|\pm\rangle = E_\pm|\pm\rangle$.

Première méthode : trouver des solutions évidentes (pas si facile ici).

Deuxième méthode : $K - E_\pm\mathbb{1}|\pm\rangle = 0 \Rightarrow \begin{vmatrix} -\frac{\Delta}{2} - E_\pm & W^* \\ W & \frac{\Delta}{2} - E_\pm \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 - E_\pm^2 + |W|^2 = 0$

Troisième méthode : K est diagonalisable *i.e.* $K = PDP^{-1}$ avec $D = \begin{pmatrix} E_+ & 0 \\ 0 & E_- \end{pmatrix}$.

On obtient alors :

— $\mathrm{Tr}(K) = \mathrm{Tr}(D) = E_+ + E_- = 0$.

— $\mathrm{Det}(K) = -\left[\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + |W|^2\right] = \mathrm{Det}(D) = E_+E_-$

$$E_\pm = \pm\sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + |W|^2}$$

1.8 On étudie les cas asymptotiques :

Faible couplage : $|W| \ll |\Delta| \Rightarrow E_\pm = \pm\left[\frac{\Delta}{2} + \frac{W^2}{\Delta}\right] + o(W^2/\Delta) \sim \pm\frac{\Delta}{2}$. On retrouve les valeurs propres de H_0 quand il n'y a plus de couplage.

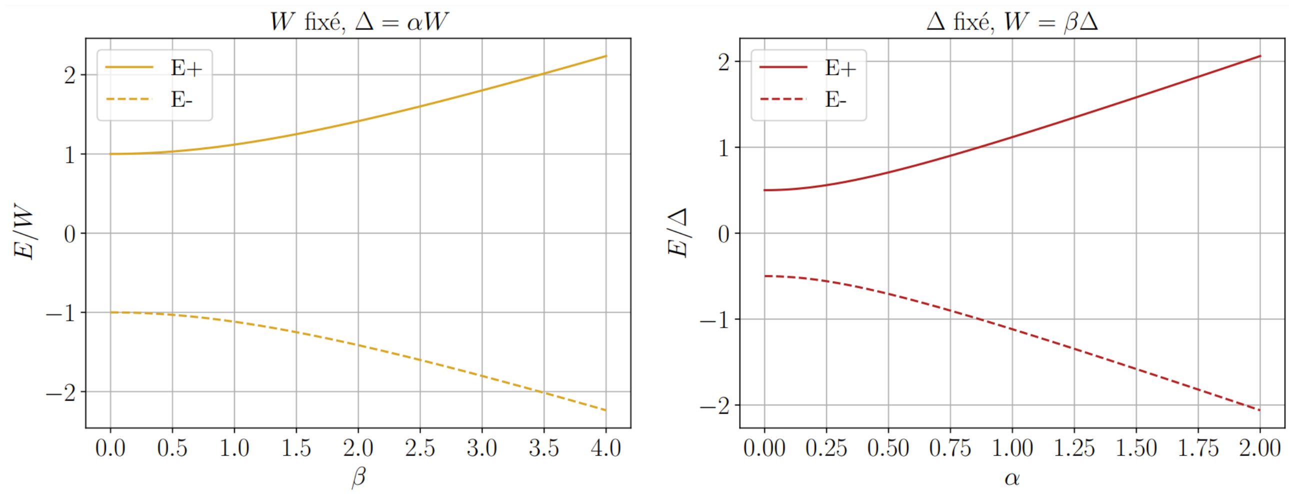
Fort couplage : $|W| \gg |\Delta| \Rightarrow E_\pm = \pm\left[W + \frac{\Delta^2}{8W}\right] + o(\Delta^2/W)$.

1.9 On trace les énergies dans différents cas :

— W fixé, $\alpha = \Delta/W \Rightarrow E_\pm = \pm\sqrt{W^2\left(1 + \frac{\alpha^2}{4}\right)}$

— Δ fixé, $\beta = W/\Delta \Rightarrow E_\pm = \pm\sqrt{\Delta^2\left(\beta^2 + \frac{1}{4}\right)}$

1.10 $K = \begin{pmatrix} -\frac{\Delta}{2} & W^* \\ W & \frac{\Delta}{2} \end{pmatrix} = -\frac{\Delta}{2}\begin{pmatrix} 1 & \tan(\theta)e^{-i\varphi} \\ \tan(\theta)e^{i\varphi} & -1 \end{pmatrix}$



1.11 On cherche $|\pm\rangle$ tel que $H|\pm\rangle = E_\pm|\pm\rangle$. Avec les notations précédentes, $E_\pm = \pm\frac{\Delta}{2|\cos\theta|}$. On se restreint à $\theta \in [0, \pi/2]$ (résultats symétriques pour $\theta \in [\pi/2, \pi[$). Ainsi, $E_\pm = \pm\frac{\Delta}{2\cos\theta}$.

$\rightarrow$ **vecteur propre** $|+\rangle = \begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \end{pmatrix}$ **:** $H \begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \end{pmatrix} = E_+ \begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \end{pmatrix}$

$$-\begin{pmatrix} \cos & \sin(\theta)e^{-i\varphi} \\ \sin(\theta)e^{i\varphi} & -\cos \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \end{pmatrix}$$

Remarques :

— c'est une écriture générale que l'on retrouve pour tout système à 2 niveaux.

— on cherche un vecteur à 2 dimensions, donc une seule inconnue : une seule équation suffit !

$$\begin{cases} a_+ = -\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\varphi}\lambda \\ b_+ = \lambda \text{ (scalaire)} \end{cases}$$

l'état quantique doit être **normalisé**, $a_+^2 + b_+^2 = 1, \Rightarrow \lambda = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\varphi} \\ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix}$$

$\rightarrow$ **vecteur propre** $|-\rangle = \begin{pmatrix} a_- \\ b_- \end{pmatrix}$ **:**

Première étape : refaire exactement comme avec $|+\rangle$.

Deuxième étape : $\langle +|-\rangle = 0 \Rightarrow -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi} a_- + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) b_- = 0$.

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

1.12 Etude des cas asymptotiques

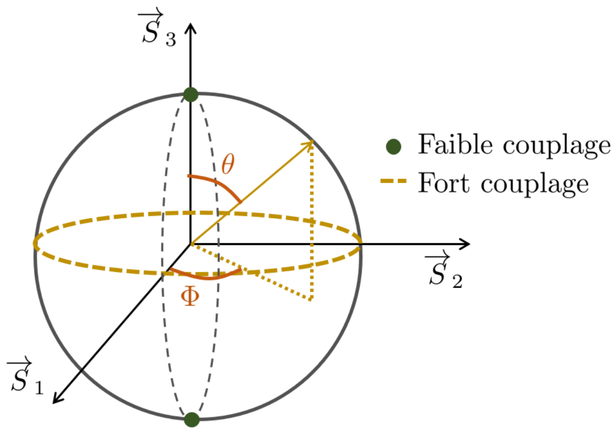
Faible couplage : $|W| \ll |\Delta| \Rightarrow \theta \sim 0$

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ et } |-\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Fort couplage : $|W| \gg |\Delta| \Rightarrow \theta \sim \frac{\pi}{2}$

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\varphi} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \text{ et } |-\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

1.13 On représente les états propres sur une sphère de Bloch :



2. Mesure quantique sur un système à deux niveaux

La mesure en physique quantique peut se comprendre comme l'application d'une observable sur un état quantique initial. **Les résultats possibles** de la mesure sont les valeurs propres de la matrice associée à l'observable. **La probabilité associée** à la mesure a assosiée à $|a\rangle$ vaut $\mathbb{P} = \langle \hat{P}_a \rangle_{|\varphi\rangle}$ où $|\varphi\rangle$ est l'état du système avant la mesure. Dans le cas d'un état non dégénéré, $\hat{P}_a = |a\rangle\langle a|$ et $\mathbb{P} = \langle \hat{P}_a \rangle_{|\varphi\rangle} = |\langle \varphi|\alpha\rangle|^2$.

2.1 $A|\varphi_0\rangle = a|\varphi_0\rangle \Rightarrow |\varphi_0\rangle$ est un vecteur propre de l'observable A. La mesure de A est donc certaine et $|\varphi_1\rangle = |\varphi_0\rangle$.

Remarque : une autre façon de voir que la mesure est certaine est de calculer la variance :

— $\langle A \rangle = \langle \varphi_0|A|\varphi_0\rangle = a$

— $\Delta a^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = 0$

Après une mesure, dans le cas d'un état dégénéré, le nouvel état physique est projeté au vecteur propre associé à la valeur propre / résultat de la mesure. Si le résultat de la mesure est a, le nouvel état physique est $|\varphi'\rangle = |a\rangle$.

2.2 Les seuls résultats possibles sont donc les valeurs propres de H, *i.e.* $\pm E_0$.

$$P(E = E_0) = |\langle 1|\varphi_0\rangle|^2 = \frac{1}{2} \text{ et } P(E = -E_0) = |\langle 2|\varphi_0\rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

2.3 $|\varphi_2\rangle = |1\rangle$

Attention : il faut bien vérifier que le nouvel état soit bien normaliser !

2.4 $|\varphi_2\rangle$ n'est plus vecteur propre de A.

Valeurs propre de A :

— $|\varphi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$ de valeur propre $+a$.

— $|\varphi_0'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle)$ de valeur propre $-a$.

$\Rightarrow P(A = a) = |\langle \varphi_0|\varphi_2\rangle|^2 = \frac{1}{2}$ et $P(A = -a) = \frac{1}{2}$

2.5 Mesure de l'énergie $\Rightarrow$ résultats de la mesure de A différentes.

3. La molécule d'ammoniac

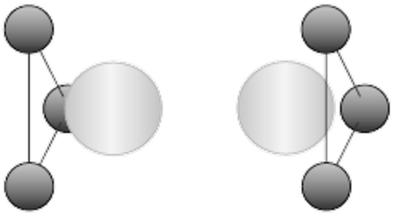


FIGURE 1 – Configurations $|L\rangle$ et $|R\rangle$ de la molécule d'ammoniac

3.1. Symétrie par réflexion

3.1.1 $T = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = T^{+} = T^{-1}$

3.1.2 $\forall|\varphi\rangle, \langle\varphi|H|\varphi\rangle = \langle\varphi|T^{+}HT|\varphi\rangle \Rightarrow TH = HT \Rightarrow [H,T] = 0.$

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & W \\ W & E_0 \end{pmatrix}$$

3.1.3 On change le zéro d'énergie : $E_0 = 0$.

$$H = \begin{pmatrix} 0 & W \\ W & 0 \end{pmatrix}$$

3.1.4 Solutions évidentes : $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + |R\rangle), E_{+} = W$ et $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle - |R\rangle), E_{-} = -W$

3.1.5 $T|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle$. T et H ont une base commune de vecteurs propres. Normal car $[H,T] = 0$ et invariance par symétrie.

Remarque : toutes ces propriétés sont équivalentes !

3.1.6 $W = 1.10^{-4}$ eV.

3.2. Evolution temporelle

Evolution temporelle $\Leftrightarrow$ Equation de Schrödinger $i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\varphi(t)\rangle = H|\varphi(t)\rangle$

3.2.1 $|\varphi_0\rangle = |L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$. Que vaut $|\varphi(t)\rangle$?

On regarde l'évolution temporelles des vecteurs propres $|\pm\rangle$ avec l'équation de Schrödinger :

$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\pm(t)\rangle = H|\pm\rangle(t) = \pm W|\pm\rangle(t) \Rightarrow |\pm\rangle(t) = e^{\mp i\frac{Wt}{\hbar}}|\pm\rangle$

$$|\varphi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-i\frac{Wt}{\hbar}}|+\rangle + e^{i\frac{Wt}{\hbar}}|-\rangle\right)$$

On repasse dans la base $\{|L\rangle, |R\rangle\}$,

$$|\varphi(t)\rangle = \cos\left(\frac{Wt}{\hbar}\right)|L\rangle - i\sin\left(\frac{Wt}{\hbar}\right)|R\rangle$$

3.2.2 Projecteur sur $|L\rangle$: $P_L = |L\rangle\langle L|$

Probabilité de mesurer l'état avec une énergie $+W$:

$$P(t) = \langle P_L\rangle^2 = |\langle L|\varphi_t\rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{Wt}{\hbar}\right)$$

Cas des états dégénérés

On s'intéresse au cas où on associe une même valeur propre pour plusieurs vecteurs propres. Par exemple, prenons comme observable

$$A = a|1\rangle\langle 1| + a|2\rangle\langle 2| + b|3\rangle\langle 3| = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}$$

et comme état quantique initial $|\varphi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + c_3|3\rangle$.

Résultats possibles : a ou b

Probabilité liée à la mesure de b : $\mathbb{P}_b = \langle \hat{P}_b\rangle_{|\varphi\rangle} = |\langle 3|\varphi\rangle|^2 = |c_3|^2$, $\hat{P}_b = |3\rangle\langle 3|$. Le nouvel état après mesure est

$$|\varphi'\rangle = |3\rangle = \frac{\hat{P}_b|\varphi\rangle}{\sqrt{\langle \hat{P}_b\rangle_{|\varphi\rangle}}}.$$

Probabilité liée à la mesure de a : $\mathbb{P}_a = \langle \hat{P}_a\rangle_{|\varphi\rangle}$ avec $\hat{P}_a = |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|$. D'où

$$\mathbb{P}_a = |\langle 1|\varphi\rangle|^2 + |\langle 2|\varphi\rangle|^2 = |c_1|^2 + |c_2|^2$$

Le nouvel état après mesure est

$$|\varphi'\rangle = \frac{\hat{P}_a|\varphi\rangle}{\sqrt{\langle \hat{P}_a\rangle_{|\varphi\rangle}}} = \frac{c_1|1\rangle + c_2|2\rangle}{\sqrt{|c_1|^2 + |c_3|^2}}.$$