

Chapitre 1

Applications des postulats de la Mécanique Quantique

1.1 Interféromètre de Mach-Zehnder

L'interféromètre de Mach-Zehnder est un exemple d'expérience qui est tiré de l'optique ; nous allons nous aider du formalisme de la mécanique quantique pour mettre en évidence l'aspect ondulatoire ou corpusculaire du photon dans cette expérience.

L'idée que nous allons souligner est la suivante : tant que le photon reste sous sa forme ondulatoire dans le dispositif, il interfère avec lui-même, et il se peut qu'un seul des deux détecteurs ne s'activent. A partir du moment où le photon prend sa forme corpusculaire dans le dispositif (parce qu'il est mesuré, perturbé), l'interférence n'a pas lieu et les deux voies de sortie peuvent être activées.

Schéma à modifier

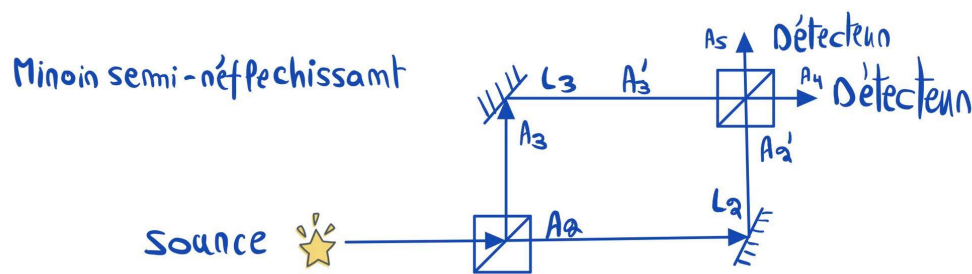


FIGURE 1.1 – Schéma du dispositif. L_2 et L_3 sont les longueurs totales du chemin 1, respectivement 2 suivi par la lumière.

1.1.1 Etude classique (la lumière classique est de nature ondulatoire)

Le faisceau lumineux, initialement divisé en deux par un premier beam-splitter (noté BM par la suite, c'est un miroir semi-réfléchissant), se recombine par les miroirs : en arrivant au deuxième BM, ils interfèrent constructivement lorsqu'ils sont en phase.

La différence de phase peut se manifester lorsque :

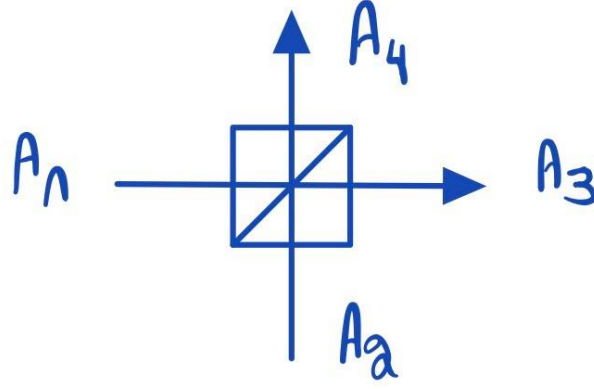
- il y a une différence de distance parcourue par chaque faisceau ;
- il y a un changement d'indice de réfraction le long du trajet (mais ce n'est pas le cas ici)

Ces phénomènes d'interférences interviennent également en fibres optiques : Schéma

Il y a interférence en fonction de la longueur relative des chemins.

Effectuons à présent une étude quantitative du problème pour déterminer l'intensité des faisceaux mesurée aux détecteurs lorsque le système est considéré d'un point de vue classique.

Considérons tout d'abord un seul BM.

FIGURE 1.2 – Schéma d'un beam-splitter ; les ondes incidentes arrivent de A_1 et A_2

On considère également deux ondes incidentes qui sont des ondes planes de même fréquence mais d'amplitude différente A_1 et A_2 :

$$\begin{aligned} A_1(t) &= A_1 e^{-i\omega t} \\ A_2(t) &= A_2 e^{-i\omega t} \end{aligned} \quad (.1)$$

Ecrivons ensuite les ondes résultantes $A_3(t)$ et $A_4(t)$ comme :

$$\begin{aligned} A_3(t) &= c A_1(t) + is A_2(t) \\ A_4(t) &= is A_1(t) + c A_2(t) \end{aligned} \quad (.2)$$

où nous pouvons prendre $c = \cos(\theta)$ et $s = \sin(\theta)$.

En effet, cela a du sens d'écrire $A_3(t)$ et $A_4(t)$ de cette manière-ci car :

- les équations de l'électromagnétisme sont linéaires (une combinaison linéaire d'ondes planes de même fréquence reste bien une onde plane) ;
- Si on suppose que l'on envoie deux faisceaux de lumières sur un miroir semi-transparent d'intensité $I_1 = |A_1|^2$ et $I_2 = |A_2|^2$, et supposons qu'il n'y a pas de perte : alors $I_1 + I_2 = I_3 + I_4$. Les amplitudes sortantes et entrantes sont reliées par une matrice, et c'est la conservation des intensités qui impliquent que cette matrice est unitaire. Ainsi, dans les relations (1.1.1), on peut choisir un des coefficients, par exemple $|c|^2$ en choisissant un miroir semi-transparent. Le coefficient $|s|^2$ est alors fixé par la relation $|c|^2 + |s|^2 = 1$. Il reste également une liberté de phase : en effet, il est possible de redéfinir la phase de $A_1 = e^{i\Phi} A'_1$; il en est de même pour les autres faisceaux.

Notons que si l'on a une onde qui parcourt une distance L d'un point A à un point A' , alors une phase de kL s'introduit dans l'expression de l'onde en ce point A' :

$$\text{en } A : A(t) = A e^{-i\omega t} \quad (.3)$$

$$\text{en } A' : A'(t) = A e^{-i\omega t} e^{ikL} \quad (.4)$$

Remarques :

1. Par convention, nous supposons que l'onde transmise ne subit aucun déphasage, tandis que l'onde réfléchie subit un déphasage de $\pi/2$ (d'autres conventions sont possibles) ;
2. Lorsqu'un faisceau de lumière arrive à un détecteur, ce que ce dernier mesure est un courant électrique $I(t) = e |A(t)|^2$.

Considérons à présent l'interféromètre qui contient 2 BM. **schéma pour représenter les A_i à chaque entrée/sortie d'un BM.**

Dans ce cas-ci, il n'y a qu'une seule source de lumière et le faisceau incident est donné par : $A(t) = A e^{-i\omega t}$ (l'intensité du faisceau à la source est alors $I_0 = |A(t)|^2 = |A|^2$). Par les relations (1.1.1), et en choisissant

$c = \frac{1}{\sqrt{2}}$ (qui n'est rien d'autre qu'un choix de phase pour simplifier les calculs) :

$$\begin{aligned} A_2(t) &= \frac{A(t)}{\sqrt{2}} \\ A_3(t) &= i \frac{A(t)}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (.5)$$

Et par (1.1.1), on trouve au deuxième BM :

$$A'_2(t) = A_2(t)e^{ikL_2} \quad (.6)$$

$$A'_3(t) = A_3(t)e^{ikL_3} \quad (.7)$$

On note $\Delta\Phi = kL_3 - kL_2$ la différence de phase entre les deux ondes au deuxième BM.

En utilisant à nouveau les relations pour les ondes sortantes du BM, on trouve :

$$A_4(t) = \frac{A'_3(t)}{\sqrt{2}} + i \frac{A'_2(t)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (A_3(t)e^{ikL_3} + iA_2(t)e^{ikL_2}) = i \frac{A(t)}{2} (e^{ikL_3} + e^{ikL_2}) \quad (.8)$$

$$A_5(t) = i \frac{A'_3(t)}{\sqrt{2}} + \frac{A'_2(t)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (iA_3(t)e^{ikL_3} + A_2(t)e^{ikL_2}) = \frac{A(t)}{2} (e^{ikL_2} - e^{ikL_3}) \quad (.9)$$

Ainsi, l'intensité des ondes aux détecteurs se trouve par :

$$I_4 = \frac{|A|^2}{4} |e^{ikL_3} + e^{ikL_2}|^2 \quad (.10)$$

$$I_5 = \frac{|A|^2}{4} |e^{ikL_2} - e^{ikL_3}|^2 \quad (.11)$$

Développons le membre de droite de (.11) pour I_4 :

$$\begin{aligned} |e^{ikL_3} + e^{ikL_2}|^2 &= |e^{ikL_3}|^2 + |e^{ikL_2}|^2 + e^{ikL_3}(e^{ikL_2})^* + e^{ikL_2}(e^{ikL_3})^* \\ &= 2 + 2\operatorname{Re}[e^{ikL_3}(e^{ikL_2})^*] \\ &= 2 + 2(\cos kL_3 \cos kL_2 + \sin kL_3 \sin kL_2) \\ &= 2(\cos(kL_3 - kL_2) + 1) \\ &= 4\cos^2 \frac{\Delta\Phi}{2} \end{aligned}$$

Par un raisonnement similaire pour le membre de droite de I_5 , nous avons finalement :

$$I_4 = |A|^2 \cos^2 \frac{\Delta\Phi}{2} \quad (.12)$$

$$I_5 = |A|^2 \sin^2 \frac{\Delta\Phi}{2} \quad (.13)$$

$$\rightarrow I_4 + I_5 = |A|^2 = I_0$$

Il y a bien conservation de l'intensité de l'onde émise, ce qui en fait était garanti par notre choix de phase car celui-ci faisait en sorte que $A_3(t)$ et $A_4(t)$ soient reliés à $A(t)$ par une transformation unitaire.

1.1.2 Etude quantique

Avec le même dispositif, nous allons cette fois considérer une source d'**un seul photon**, plutôt qu'un faisceau de lumière.

Classiquement, il serait naturel de se dire que le photon étant indivisible, ne passe que par un des deux chemins. Il arriverait alors à un détecteur ou à l'autre, avec une probabilité qui dépend du coefficient de réflexion du miroir semi-réfléchissant. En réalité, il se peut qu'un seul des deux détecteurs s'activent ; il y aurait manifestement des interférences même lorsque le faisceau est réduit à un seul photon. Il devient donc nécessaire de faire appel à la mécanique quantique pour étudier cela.

Description des états quantiques :

Si le photon peut suivre plusieurs chemins, on dira que l'état est :

$$|\psi\rangle = \alpha |1\rangle + \beta |2\rangle + \gamma |3\rangle \quad (.14)$$

Avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 = 1$, et $|i\rangle$ pour $i \in \{1, 2, 3\}$ est l'état du photon dans le chemin i .

Beam-splitter :

Un BM tel que décrit précédemment, induit une évolution donnée par :

$$\begin{aligned} |1\rangle &\rightarrow c |3\rangle + is |4\rangle \\ |2\rangle &\rightarrow is |3\rangle + c |4\rangle \end{aligned} \quad (.15)$$

Cette évolution est décrite par la matrice $\begin{pmatrix} c & is \\ is & c \end{pmatrix}$ qui est unitaire unitaire (ce qui est cohérent par le postulat qui exprime le fait que l'évolution des états se fait de manière unitaire).

Détecteur du photon :

Schéma des détecteurs avec 2 chemins Supposons que l'on mesure le photon dans la base $|1\rangle$ et $|2\rangle$.

Si l'état du photon est donné par $|\psi\rangle = \alpha |1\rangle + \beta |2\rangle$, alors les probabilités de détection seront données par :

$$\begin{aligned} P(click1) &= |\alpha|^2 \\ P(click2) &= |\beta|^2 \end{aligned} \quad (.16)$$

Description quantique de l'interféromètre :

La description de l'expérience découle en effet naturellement des points précédents durant lesquels on formalise l'expression des états du système, de l'évolution d'un état en passant par un BM, et des probabilités de détection d'un photon ;

Initialement : $|\psi\rangle = |1\rangle \equiv$ état d'un photon dans le chemin 1

→ 1er passage dans le BM : $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |2\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |3\rangle$

→ Après avoir parcouru L_2 ou L_3 : $|\psi\rangle = \frac{e^{ikL_2}}{\sqrt{2}} |2'\rangle + i \frac{e^{ikL_3}}{\sqrt{2}} |3'\rangle$

→ 2ème passage dans le BM : par (1.1.2), on a que :

$$\begin{aligned} |3'\rangle &\rightarrow c |4\rangle + is |5\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|4\rangle + |5\rangle) \\ |2'\rangle &\rightarrow is |4\rangle + c |5\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (i |4\rangle + |5\rangle) \end{aligned} \quad (.17)$$

Donc $|\psi\rangle = \frac{e^{ikL_2}}{\sqrt{2}} |2'\rangle + i \frac{e^{ikL_3}}{\sqrt{2}} |3'\rangle$ devient $|\psi\rangle = \frac{1}{2} (e^{ikL_2} - e^{ikL_3}) |5\rangle + \frac{i}{2} (e^{ikL_2} + e^{ikL_3}) |4\rangle$

→ Probabilité de détection : par (1.1.2), on trouve :

$$P(click4) = \cos^2 \frac{\Delta\Phi}{2} \quad (.18)$$

$$P(click5) = \sin^2 \frac{\Delta\Phi}{2} \quad (.19)$$

Le photon est simultanément dans les chemins 2 et 3. On observe d'ailleurs que s'ils ne sont pas déphasés, *i.e* $\Delta\Phi = 0$, alors $P(click 4) = 1$: il y a une interférence constructive qui fait qu'avec probabilité 1, seul un détecteur va s'enclencher. Le photon agit donc bien comme une onde.

Modification d'un paramètre du dispositif :

Nous pouvons imaginer deux situations qui diffèrent de l'expérience initiale.

Premièrement, regardons ce qu'il se passe lorsqu'un des chemins est bloqué : **Schéma d'un chemin bloqué**
 Dans ce cas-ci, il est clair que

$$P(D_2click) = 1/2$$

$$P(D_4click) = 1/4$$

$$P(D_5click) = 1/4$$

Deuxièmement, on pourrait aussi supprimer le deuxième BM, et dans ce cas : **Schéma d'un BM en moins**

$$P(D_4click) = 1/2$$

$$P(D_5click) = 1/2$$

Dans ces deux derniers cas, les probabilités sont simplement données par le fait qu'il y ait autant de chance que le photon soit réfléchi qu'il soit transmis, en passant par un BM. Le photon ici agit donc comme une particule.

Delayed choice experiment (Wheeler-1978) :

Une question que l'on pourrait se poser est la suivante : "*Est-ce que le photon sait-il d'avance ce qu'il doit faire ?*", autrement dit, selon les configurations du système, le photon décide-t-il d'agir comme une particule ou comme une onde ?

Par exemple, pourquoi pas enlever/remettre un BM, changer la phase $\Delta\Phi$, **après** que le photon soit entré dans l'interféromètre. Des expériences montrent cependant que le photon peut être simultanément onde et particule à la fois ; l'interprétation où l'on suppose que le photon "sait à l'avance ce qu'il doit faire" ne tient donc pas.

1.1.3 Elitzur-Vaidman "bomb tester" (1993), expérience de pensée

petit schéma avec la bombe

Soit $\mathcal{B} \equiv$ une bombe armée (explose si 1 seul photon touche le senseur),
 et $\mathcal{B}^* \equiv$ une bombe non-armée (pas de senseur présent).

Supposons que l'on dispose de bombes armées et non-armées, mais indistinguables.
 Comment pourrions-nous faire pour sélectionner une bombe armée ?

Disposons-nous d'un interféromètre, réglé tel que $\Delta\Phi = 0$. Par l'étude précédente de l'interféromètre, nous savons que $P(click4) = 1$ et $P(click5) = 0$.

Perturbons à présent le système en plaçant une bombe sur le chemin 2 ; autrement dit, cela revient à bloquer le chemin 2 si la bombe est armée, ou à ne rien faire si la bombe n'est pas armée ;

— Si la bombe n'est pas armée : $P(click4) = 1$; $P(click5) = 0$

— Si la bombe est armée : $P(Boum) = 1/2$; $P(click4) = 1/4$ et $P(click5) = 1/4$.

Un click en 5 signifierait donc que l'on a une bombe armée de manière fiable, et elle n'a pas explosé !

1.2 Oscillations de neutrinos

Une particule est dite élémentaire lorsque sa composition nous est inconnue. L'étude du comportement de ce type de particules fait l'objet de la physique des particules. Le plus récent modèle mathématique décrivant cette réalité est un résultat connu sous le nom de *modèle standard des particules élémentaires*. Un exemple de telle particule est l'électron, rencontré dans les atomes. Il se trouve que le neutrino en est un autre exemple. Notons que la découverte de cette particule est extrêmement récente à l'échelle de l'histoire de la science et de l'humanité : elle a été prédite par Pauli en 1930, et ne fût observée pour la première fois qu'en 1956.

Une des propriétés fondamentales du neutrino est qu'elle n'interagit que très faiblement avec la matière. Aussi, ceci explique pourquoi sa découverte n'est que très récente : il aurait auparavant été tout bonnement impossible de l'observer, en raison de limitation technologiques. Les neutrinos sont produites lors de certaines réactions stellaire ; notons de plus qu'il existe 3 "saveurs" de neutrinos :

— Neutrino électronique, noté ν_e et l'anti-particule associée ;

- Neutrino muonique, noté ν_μ et l'anti-particule associée ;
- Neutrino tau, noté ν_τ et l'anti-particule associée.

La plupart des neutrinos observés sur Terre sont produite par le Soleil, selon la réaction

$$p^+ + p^+ \longrightarrow D^+ + e^+ + \nu_e \quad (.20)$$

où p^+ représente un proton, D^+ correspond à **un noyau de deutérium (c'est à dire à un proton et un neutron)** et où ν_e et $\bar{\nu}_e$ indiquent respectivement un neutrino électronique et l'anti-neutrino correspondant. Dans cette réaction, on définit le *nombre leptonique* par la relation

$$Le = \#e^- + \#\nu_e - (\#e^+ + \#\bar{\nu}_e) \quad (.21)$$

Proposition 1.2.1. *Lors d'une interaction, le nombre leptonique Le constitue une quantité conservée.*

Une fois produite, les neutrinos se propagent presque sans absorption jusqu'à la terre - nous pouvons à présent les mesurer, mais cela reste un exercice non trivial (*et n'est donc pas laissé en exercice pour le lecteur*). **Ray David et Masatoshi Koshiba eurent le Prix Nobel de Physique 2002 pour avoir réussi à démontrer que nous détectons approximativement un tiers du flux de neutrino attendu.** Dans la résolution qui va suivre, nous supposons que les neutrinos ont une masse (aussi faible soit-elle), et que les états propre de masse ne sont pas les états produits/absorbés lors de son interaction avec la matière.

Résolution pour une seule espèce de neutrinos

Supposons que nous ne travaillons qu'avec un neutrino ν dont nous ne précisons pas la saveur. Soit E son énergie, et $\Psi(x, t)$ sa fonction d'onde : nous pouvons choisir une onde plane pour la décrire, selon

$$\Psi(x, t) = e^{-(Et - px)} \quad (.22)$$

où nous sommes passés dans le système naturelle d'unité avec $\hbar = 1 = c$. Dans la limite ultra-relativiste, $E, p \gg m$ où l'énergie est donnée par la relation de dispersion

$$E^2 = m^2 + p^2 \Rightarrow p \approx E - \frac{m^2}{2E} \quad (.23)$$

Nous pouvons alors réécrire la fonction d'onde sous la forme

$$\psi(x, t) = e^{-i(E[t-x] + \frac{m^2}{2E}x)} = e^{-iE(t-x)} e^{-i\frac{m^2}{2E}x}$$

Finalement, cette égalité peut-être écrite sous forme vectorielle :

$$|\psi(x, t)\rangle = e^{-iE(t-x)} e^{-i\frac{m^2}{2E}x} |\nu\rangle \quad (.24)$$

où $|\nu\rangle$ dénote l'espèce de neutrino en question.

Résolution pour 2 espèces de neutrinos

Nous supposons à présent l'existence de deux espèces de neutrino : le neutrino électronique et le neutrino muonique, dénotés $|\nu_e\rangle$ et $|\nu_\mu\rangle$ dans nos conventions. Le soleil produit $|\nu_e\rangle$, et nous ne sommes capable de détecter (sur Terre) que cette dernière.

Si nous mesurons un neutrino à un moment quelconque de la propagation, elle aurait une certaine probabilité d'être électronique, et une certaine probabilité d'être muonique. Nous pouvons traduire cela en le fait qu'elle ait une certaine probabilité d'être de masse m_1 , et une certaine probabilité d'être de masse m_2 . Nous noterons ces deux états $|\nu_1\rangle$ et $|\nu_2\rangle$.

Nous travaillons dans les bases $\{|\nu_e\rangle, |\nu_\mu\rangle\}$ et $\{|\nu_1\rangle, |\nu_2\rangle\}$. Nous sommes donc dans un système à deux niveau, c'est à dire tel que $\dim \mathcal{H} = 2$. Dans ce cas,

$$\begin{cases} |\nu_e\rangle = \cos \theta |\nu_1\rangle + \sin \theta |\nu_2\rangle \\ |\nu_\mu\rangle = -\sin \theta |\nu_1\rangle + \cos \theta |\nu_2\rangle \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} |\nu_1\rangle = \cos \theta |\nu_e\rangle - \sin \theta |\nu_\mu\rangle \\ |\nu_2\rangle = \sin \theta |\nu_e\rangle + \cos \theta |\nu_\mu\rangle \end{cases} \quad (.25)$$

1. Au temps $t_0 = 0$, le soleil produit un neutrino électronique $|\nu_e\rangle$. On peut exprimer ceci dans la base $\{|\nu_e\rangle, |\nu_\mu\rangle\}$, soit

$$|\psi(t_0, x = 0)\rangle = |\nu_e\rangle = \cos \theta |\nu_1\rangle + \sin \theta |\nu_2\rangle .$$

2. Le neutrino se propage vers la Terre. Nous exprimons alors ce déplacement dans la base $\{|\nu_1\rangle, |\nu_2\rangle\}$, afin de prévoir les cas de changement spontané de saveur du neutrino. La fonction d'onde peut alors se réécrire sous la forme suivante, en vertu de (24).

$$|\psi(t, x)\rangle = e^{-iE(t-x)} \left[e^{-i\frac{m_1^2}{2E}x} \cos\theta |\nu_1\rangle + e^{-i\frac{m_2^2}{2E}x} \sin\theta |\nu_2\rangle \right]$$

3. Finalement, en $x = L$, le neutrino arrive sur Terre. Retournons dans la base des saveurs, afin de pouvoir les discerner.

$$\begin{aligned} |\psi(t, x=L)\rangle &= e^{-iE(t-L)} \left[e^{-i\frac{m_1^2}{2E}L} \cos\theta \{ \cos\theta |\nu_e\rangle - \sin\theta |\nu_\mu\rangle \} + e^{-i\frac{m_2^2}{2E}L} \sin\theta \{ \sin\theta |\nu_e\rangle + \cos\theta |\nu_\mu\rangle \} \right] \\ &= e^{-iE(t-L)} \left[\left(\cos^2\theta e^{-i\frac{m_1^2}{2E}L} + \sin^2\theta e^{-i\frac{m_2^2}{2E}L} \right) |\nu_e\rangle + \left(e^{-i\frac{m_2^2}{2E}L} - e^{-i\frac{m_1^2}{2E}L} \right) \cos\theta \sin\theta |\nu_\mu\rangle \right] \end{aligned}$$

Expérimentalement, nous ne pouvons détecter que les neutrino électronique. Pourtant, la probabilité que le neutron électronique du départ devienne un neutrino muonique est non-nulle, et est donnée par

$$P(NO \nu) = \|\langle \nu_\mu | \psi(t, L) \rangle\|^2 = \left\| \left(e^{-i\frac{m_2^2}{2E}L} - e^{-i\frac{m_1^2}{2E}L} \right) \cos\theta \sin\theta \right\|^2 = \sin^2 2\theta \sin^2 \left(\frac{\Delta m^2 L}{4E} \right) \quad (.26)$$

où nous avons posé $\Delta m^2 = m_1^2 - m_2^2$. Il existe donc une probabilité non-nulle que nous ne puissions pas faire de mesure.

Empiriquement, il se trouve que $\sin^2 2\theta \approx 0.85$ et $\Delta m^2 \approx 810^{-5} eV^2$. Notons qu'en réalité le problème est un peu plus complexe, car il existe 3 saveurs de neutrinos et non deux : cette résolution naïve pour 2 saveurs permet cependant de bien mettre en évidence la réalité physique, et les effets quantiques présents dans ce système.

1.3 Ammoniac : oscillations de Rabi

Nous avons déjà étudié la molécule d'ammoniac, et ses deux états possibles, notés $|1\rangle$ et $|2\rangle$. La transition d'un état à l'autre est l'œuvre de l'effet tunnel et sera décrite dans la section suivante. Dans cette section, nous nous intéressons à la **polarité** de cette molécule, et l'interaction entre son dipôle et un champ électrique oscillant. Plus précisément, la fréquence du champ oscillant sera calibrée sur la fréquence de transition entre les deux états $|1\rangle$ et $|2\rangle$ – aussi appelée *fréquence de Bohr*.

Un système à deux niveaux excité à sa fréquence de résonance subit des oscillations, appelées *oscillations de Rabi*, que nous calculerons dans cette section.

1.3.1 Dispositif et hamiltonien

Le phénomène que nous essayons ici de réaliser est de manipuler un état en lui faisant subir une impulsion lumineuse. La molécule arrive dans la cavité avec une certaine vitesse, subit l'effet du champ électrique pour lui faire *changer d'état* (nous comparerons les états d'entrée et de sortie plus loin) et sort enfin de la cavité. Pour décrire l'évolution de la molécule dans la cavité, nous devons étudier son hamiltonien, qui doit tenir compte de l'interaction entre son dipôle et le champ électrique.

Le hamiltonien de la molécule de NH_3 , en tenant compte de la possible transition par effet tunnel, est repris ci-dessous.

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix} \quad (.27)$$

Ajoutons à cela une interaction entre le dipôle électrique

$$\vec{\mu}_{|1\rangle, |2\rangle} = pm\mu \vec{1}_z$$

de la molécule et le champ oscillant

$$\vec{E} = \mathcal{E}(x) \cos(\omega_0 t) \vec{1}_z .$$

Ajouter dispositif

Comme la molécule traverse la cavité avec une certaine vitesse, l'amplitude du champ qu'elle subira peut être écrit comme dépendant seulement du temps :

$$\mathcal{E}(x) \rightarrow \mathcal{E}_0(t) ,$$

de sorte à ce que l'énergie d'interaction entre le champ et le dipôle puisse s'écrire comme dépendant seulement du temps :

$$W = \pm \mu \mathcal{E}_0(t) \cos(\omega_0 t) .$$

Avec cette énergie d'interaction, le hamiltonien du système devient dépendant du temps et peut s'écrire

$$H = \begin{pmatrix} E_0 + \mu \mathcal{E}_0(t) \cos(\omega_0 t) & -A \\ -A & E_0 - \mu \mathcal{E}_0(t) \cos(\omega_0 t) \end{pmatrix} \quad (.28)$$

et nous pouvons écrire un état comme une combinaison linéaire des vecteurs propres avec des coefficients dépendant du temps :

$$|\psi\rangle = C_1(t) |1\rangle + C_2(t) |2\rangle .$$

1.3.2 Réécriture dans la base propre

Nous pouvons modifier l'écriture précédente pour faciliter l'étude de l'impact du champ électrique. En effet, si nous posons

$$|I\rangle = \frac{|1\rangle - |2\rangle}{\sqrt{2}} \quad |II\rangle = \frac{|1\rangle + |2\rangle}{\sqrt{2}} ,$$

nous pouvons toujours trouver des coefficients $\gamma_I(t)$ et $\gamma_{II}(t)$ tels que

$$|\psi\rangle = \gamma_I(t) e^{-i(E_0+A)t/\hbar} |I\rangle + \gamma_{II}(t) e^{-i(E_0-A)t/\hbar} |II\rangle . \quad (.29)$$

Cette écriture utile permet de comparer cette situation à celle obtenue lors de notre première étude de la molécule d'ammoniac. En effet, si le champ est d'amplitude nulle ($\mathcal{E}_0 = 0$), alors le hamiltonien (.28) devient égal au hamiltonien (.27), et la solution s'écrit comme (.29) avec γ_I et γ_{II} constantes, comme à la section précédente.

1.3.3 Résolution de l'équation de Schrodinger

Avec l'écriture de l'état $|\psi\rangle$ selon (.29), l'équation de Schrodinger

$$i\hbar \partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle$$

devient, en posant $\omega = 2A/\hbar$,

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt}(t) &= \mu \mathcal{E}_0(t) \cos(\omega_0 t) e^{i\omega t} \gamma_{II}(t) \\ i\hbar \frac{d\gamma_{II}}{dt}(t) &= \mu \mathcal{E}_0(t) \cos(\omega_0 t) e^{-i\omega t} \gamma_I(t) \end{cases} .$$

La fréquence que nous avons posée est la *fréquence de Bohr*, la fréquence de la transition, comme déjà discuté à la section précédente. L'objet des oscillations de Rabi est le comportement de ce système à la résonance, c'est-à-dire lorsque la fréquence extérieure (celle du champ, ω_0) approche la fréquence propre du système ω .

Pour continuer notre résolution de l'équation de Schrodinger, posons comme hypothèse que $\mathcal{E}_0(t)$ varie lentement **à quoi ça nous sert ?**, et que ω et ω_0 ont même ordre de grandeur. En développant le cosinus, la *rotating wave approximation* peut être utilisée. Elle consiste à négliger les termes d'un hamiltonien qui oscillent rapidement. Suivant cette approximation, nous avons alors :

$$\begin{aligned} \cos(\omega_0 t) e^{i\omega t} &= \frac{1}{2} e^{i(\omega+\omega_0)t} + \frac{1}{2} e^{i(\omega-\omega_0)t} \\ &\approx \frac{1}{2} e^{i(\omega-\omega_0)t} , \end{aligned}$$

et le système d'équations devient

$$\begin{cases} i\hbar \dot{\gamma}_I(t) &= \mu \mathcal{E}_0(t) e^{i(\omega-\omega_0)t} \gamma_{II}(t) \\ i\hbar \dot{\gamma}_{II}(t) &= \mu \mathcal{E}_0(t) e^{-i(\omega-\omega_0)t} \gamma_I(t) \end{cases} .$$

Notons qu'il s'agit là d'un des très rares cas où l'équation de Schrodinger dépendant du temps est soluble.

À la résonance ($\omega = \omega_0$), le système devient

$$\begin{cases} i\hbar\dot{\gamma}_I(t) &= \mu\mathcal{E}_0(t)\gamma_{II}(t) \\ i\hbar\dot{\gamma}_{II}(t) &= \mu\mathcal{E}_0(t)\gamma_I(t) \end{cases}.$$

Ce système d'équations différentielles couplées peut se résoudre en posant

$$\gamma_+ = \frac{\gamma_I + \gamma_{II}}{\sqrt{2}} \quad \gamma_- = \frac{\gamma_I - \gamma_{II}}{\sqrt{2}},$$

donnant alors (la dépendance en t de γ n'a pas été reprise pour alléger l'écriture)

$$\begin{cases} i\hbar\frac{d\gamma_+}{dt} &= \mu\mathcal{E}_0(t)\gamma_+ \\ i\hbar\frac{d\gamma_-}{dt} &= -\mu\mathcal{E}_0(t)\gamma_- \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{d\gamma_+}{\gamma_+} &= \mu - \frac{i}{\hbar}\mathcal{E}_0(t)dt \\ \frac{d\gamma_-}{\gamma_-} &= \mu + \frac{i}{\hbar}\mathcal{E}_0(t)dt \end{cases}.$$

En intégrant alors entre les temps $-\infty$ et t , nous obtenons la solution

$$\begin{cases} \gamma_+(t) &= \gamma_+(-\infty)e^{-i\Phi(t)} \\ \gamma_-(t) &= \gamma_-(-\infty)e^{i\Phi(t)} \end{cases}$$

où

$$\Phi(t) = \int_{-\infty}^t dt' \mu \frac{\mathcal{E}_0(t')}{\hbar}. \quad (.30)$$

1.3.4 État en sortie de cavité

Intéressons-nous à l'état en sortie de cavité, au temps $t = +\infty$, et comparons à l'état de la particule avant d'y entrer, au temps $t = -\infty$.

$$\begin{cases} \gamma_+(+\infty) &= \gamma_+(-\infty)e^{-i\Phi} \\ \gamma_-(+\infty) &= \gamma_-(-\infty)e^{i\Phi} \\ \Phi &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \mu \frac{\mathcal{E}_0(t')}{\hbar} \end{cases}$$

Avec les définitions de $\gamma_{+,-}$ en fonction de $\gamma_{I,II}$, nous pouvons réécrire.

$$\begin{cases} \gamma_I(t = +\infty) &= \gamma_I(t = -\infty) \cos \Phi &+ i\gamma_{II}(t = -\infty) \sin \Phi \\ \gamma_{II}(t = +\infty) &= i\gamma_I(t = -\infty) \sin \Phi &+ \gamma_{II}(t = -\infty) \cos \Phi \end{cases}$$

L'évolution dans la cavité se décrit alors comme une rotation dans l'espace des états propres, d'un angle Φ . Nous pouvons en effet considérer :

- Si $\gamma_I(-\infty) = 1$ ¹, étant donc initialement dans l'état I, alors nous pouvons écrire la probabilité de trouver la molécule dans l'état I en sortie de cavité ($t = \infty$) comme fonction de Φ , en utilisant l'écriture (.29) de l'état et le postulat de la mesure :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(|I\rangle, t = +\infty) &= \lim_{t \rightarrow +\infty} \left| \gamma_I(t) e^{-i(E_0+A)t/\hbar} \right|^2 \\ &= \lim_{t \rightarrow +\infty} |\gamma_I(t)|^2 \\ &= |\cos \Phi|^2 \end{aligned}$$

Insérer graphique !

Le paramètre Φ de la transition peut donc être choisi de sorte à ce que la molécule sorte dans un état ou dans l'autre. En pratique, vu les dépendances (.30) de Φ , il est possible de le faire varier,

- en modifiant l'intensité du champ : modifie $\mathcal{E}(x)$, donc $\mathcal{E}_0(t)$, donc Φ ;
- en modifiant la vitesse de la molécule : modifie $\mathcal{E}_0(t)$, donc Φ .

1. et alors $\gamma_{II}(-\infty) = 0$, car $|\gamma_I|^2 + |\gamma_{II}|^2 = 1$ pour tout temps t , en particulier donc pour $t \rightarrow -\infty$.

1.4 Résonance quantique

Nous entamons ici l'étude de 3 exemples différents de systèmes quantiques à 2 états - des systèmes différents, mais liés par le fait qu'ils possèdent une symétrie. Cette symétrie impose des conditions menant à des résultats parfois surprenants.

Exemple 1 : La molécule d'ammoniac NH_3

L'étude de la géométrie de cette molécule montre que les trois atomes d'hydrogène forment la base d'une pyramide dont l'atome d'azote occupe le sommet : l'ammoniac forme une molécule pyramidale trigonale. La figure 1.3 donne une représentation de la géométrie de la molécule d'ammoniac. Dans notre exemple, nous supposons que les atomes d'hydrogène forment un triangle équilatéral et dont l'axe passe toujours par l'atome d'azote. Nous avons alors que l'énergie potentielle du système n'est fonction que de la distance entre l'atome d'azote et le triangle équilatéral formé par les atomes d'hydrogène. En particulier, le système admet alors une symétrie par rapport au plan $x = 0$: cela impose à la fonction de l'énergie potentielle $V(x)$ d'être paire selon la variable x .

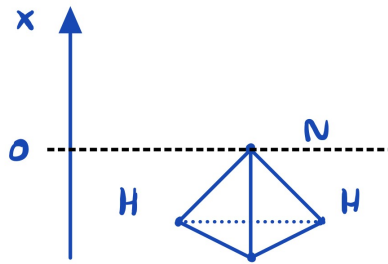


FIGURE 1.3 – Schéma d'une molécule d'ammoniac. La distance x désigne la distance entre le plan formé par les atomes d'hydrogène et l'atome d'azote.

Soit $|x| = b$ la distance minimisant l'énergie potentielle. Puisque l'énergie potentielle est *paire*, nous avons que $V(-b) = V(b)$. Choisissons l'échelle de l'énergie de sorte que $V(b) = 0$. Nous avons alors une barrière de potentiel en $x = 0$, d'énergie $V_1 > V_0 = 0$.

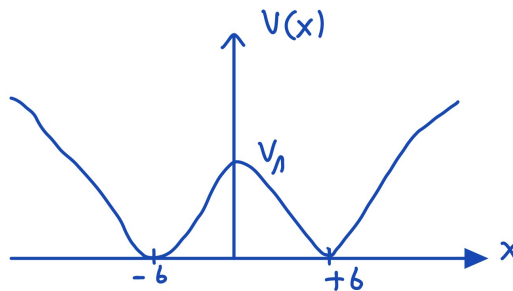


FIGURE 1.4 – Représentation de l'énergie potentielle en fonction de la distance x . On observe que lorsque $\|x\| > b$, l'énergie augmente significativement : cela correspond à la croissance de la force de liaison chimique assurant la cohésion moléculaire. La barrière de potentiel en $x = 0$ traduit la force de répulsion entre les atomes d'hydrogène et l'atome d'azote lorsque ce dernier est dans le plan qu'ils forment.

Que prédit la mécanique quantique sur les niveaux d'énergie de ce système ? Classiquement, il n'est pas possible pour une particule d'énergie inférieure à V_1 de franchir la barrière de potentiel placée en $x = 0$. Nous aurions alors que l'atome d'azote resterait toujours du même côté du plan formé par les atomes d'hydrogène. Cependant, comme nous l'avons étudié en ??, le phénomène d'effet tunnel autorise les états d'énergie inférieure : l'inversion de la molécule est alors une réalité quantique inexplicable par la mécanique classique.

Notons par $|+\rangle$ l'état dans lequel l'atome d'azote est au-dessus des atomes d'hydrogènes, et par $|-\rangle$ lorsqu'il est en-dessous. Dans la base formée par ces deux états, l'Hamiltonien de ce système s'exprime par

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix} \quad (.31)$$

où E_0 représente l'énergie fondamentale du système, et A est une perturbation que l'on fait subir au système.

De part le postulat de la mesure, les valeurs de la mesure d'une observable sont les valeurs propres associées à celle-ci : un calcul rapide du spectre de (.31) permet de montrer que nous avons un

- état propre $|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle + |+\rangle)$ d'énergie $E_0 - A$;
- état propre $|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle - |+\rangle)$ d'énergie $E_0 + A$.

Nous voyons alors qu'il existe une énergie, $E_0 - A$, plus petite que E_0 : cela montre que la molécule d'ammoniac est très stable.

Exemple 2 : La molécule de benzène

Les chimistes représentent des molécules organiques compliquées avec des schémas somme toute assez simple. Nous discutons ici d'une de ces molécules : la plus intéressante d'entre elles, la molécule de benzène. Selon les représentations utilisées par les chimistes, elle se représente par la figure suivante.

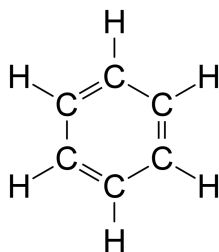


FIGURE 1.5 – Représentation d'une molécule de benzène C_6H_6 . Une barre représente une "paire" d'électrons dans une liaison covalente - de même, les doubles bars correspondent à une double paire d'électrons impliquées dans la liaison.

Cette molécule est intéressante sur plusieurs niveaux : nous avons par exemple que l'énergie théorique nécessaire pour former la molécule (calculée en effectuant la somme de l'énergie des composants) est plus petite que l'énergie expérimentalement mesurée. Nous allons nous intéresser ici à un autre aspect de cette molécule. En regardant la figure 1.5, on observe qu'il y a un totale de 3 double liaisons. Deux double liaisons à gauche, et une à droite. Rien ne nous empêche, à priori, de faire l'inverse : une double liaison à gauche, et deux double liaisons à droite. Cela donnerait quelque chose comme représenté par la figure 1.6.

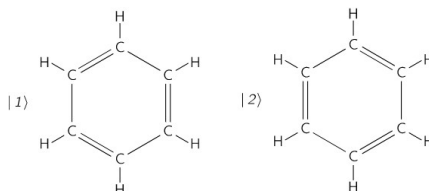


FIGURE 1.6 – Parallèle entre les deux types de molécule de benzène possible.

Les deux molécules étant la même, elles devraient avoir la même énergie. Nous devons alors les analyser comme un système à deux niveaux : chaque état représente une configuration possible de l'ensemble des électrons, et il existe une probabilité non nulle que l'ensemble passe d'une configuration à l'autre. Notons par $|1\rangle$ la première disposition possible, et par $|2\rangle$ la seconde. Dans la base orthonormale formée par ces états, l'Hamiltonien décrivant le système est à nouveau donné par (.31). L'état de plus basse énergie est alors à nouveau donnée par $|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$, d'énergie $E_0 - A$. Cette énergie étant plus faible que E_0 , nous avons à nouveau une indication de la stabilité de la molécule de benzène.

Exemple 3 : Ion moléculaire H_2^+

Pour finir, considérons deux protons séparés par une distance r , ainsi qu'une particule d'électron qui peut soit être dans le voisinage du proton de gauche, soit dans le voisinage du proton de droite.

Classiquement, une fois que l'électron est stable dans une des deux situations, elle ne peut se retrouver dans l'autre : nous pouvons voir cela en analysant les forces électromagnétiques s'appliquant à l'électron. Quantiquement, l'électron peut librement se déplacer d'un voisinage à l'autre : il s'agit une fois de plus d'une application



FIGURE 1.7 – Mise en parallèle des deux positions possible de l'électron : soit à gauche, dans l'état $|1\rangle$, soit à droite, dans l'état $|2\rangle$.

de l'*effet tunnel*.

Nous pouvons à nouveau appliquer l'Hamiltonien (.31) à cette situation, à une subtilité clé : $E_0(r)$ et $A(r)$ dépendent ici de la distance r entre les deux protons. Nous avons donc

$$H(r) = \begin{pmatrix} E_0(r) & -A(r) \\ -A(r) & E_0(r) \end{pmatrix} \quad (.32)$$

où $E_0(r)$, lorsque les atomes sont proches, décrit la répulsion entre les protons.

Dans ce modèle, nous avons alors que l'état fondamental est $\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$, d'énergie $E_-(r) = E_0(r) - A(r)$, et que l'état excité est donné par $\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle)$, d'énergie $E_+(r) = E_0(r) + A(r)$. *Ce modèle, naïf, forme la base de la compréhension des modèles chimiques. La figure 1.8 donne une idée de l'allure de $E_-(r)$ et de $E_+(r)$.*

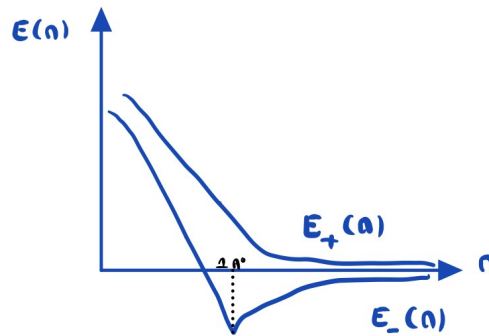


FIGURE 1.8 – Représentation et mise en parallèle de l'évolution de $E_-(r)$ et $E_+(r)$.

1.5 Spin $\frac{1}{2}$: quantification du moment angulaire

Nous présentons dans cette section une autre application des postulats de la Mécanique Quantique évoqués au chapitre précédent. L'expérience de Stern-Gerlach a permis de mettre en avant une **quantification du moment angulaire** observée expérimentalement. Cet effet purement quantique sera brièvement étudié dans cette section (plutôt "introduit" ici, et étudié dans le cours de BA3). Nous allons utiliser les postulats de la Mécanique Quantique pour formaliser la quantification du moment angulaire.

Une particule de spin $1/2$ est une particule dont la composante du moment cinétique dans une direction (disons O_z) peut prendre les valeurs $-1/2$ ou $1/2$.

Plus précisément, étant donné que nous parlons d'une grandeur physique, nous allons voir quelle observable la représente, et que ce sont les propriétés de cette observable qui impliqueront la **quantification** de ses valeurs propres. Nous allons également étudier la **conservation** du moment cinétique voir que cet effet est dû à un principe très cher en physique : l'**invariance par rotation**.

Dans cette section, l'étude du moment cinétique est organisé en trois parties :

1. Le lien avec les rotations : introduction au groupe des rotations ;
2. L'invariance par rotation et la quantification du moment angulaire ;
3. Application : représentation du groupe des rotations en 2D par les matrices de Pauli, et mise en avant des vecteurs propres.

Remarque sur les moments cinétiques en mécanique quantique

Nous commencerons cette section en discutant de l'équivalent quantique du moment cinétique classique \mathbf{L} , et nous enchaînerons ensuite sur une description générale du moment cinétique **total** d'une particule en mécanique quantique, qu'on note \mathbf{J} , composé :

- du moment cinétique angulaire (aussi appelé "moment cinétique orbital") \mathbf{L} , dû au mouvement de la particule (par exemple, dans un potentiel central comme en mécanique classique) ;
- et du moment cinétique intrinsèque (ou "moment cinétique de spin"), noté \mathbf{S} , celui intervenant dans l'expérience de Stern-Gerlach et n'ayant aucun équivalent classique.

1.5.1 Groupe des rotations

Le titre de cette section mène à la définition des deux notions suivantes :

Définition 1.5.1. *Un groupe G est un ensemble d'éléments, muni d'une opération ("opération de groupe", ou "loi de composition") notée " \cdot " qui satisfait les propriétés suivantes :*

- *Le produit est interne : $\forall g_1, g_2 \in G : g_1 \cdot g_2 \in G$*
- *Le produit est associatif : $\forall g_1, g_2, g_3 \in G : g_1 \cdot (g_2 \cdot g_3) = (g_1 \cdot g_2) \cdot g_3$.*
- *Existence d'un élément neutre : $\exists e \in G \text{ t. } \forall g \in G : e \cdot g = g = g \cdot e$.*
- *Existence d'un inverse pour tout élément du groupe : $\forall g \in G, \exists g^{-1} \in G \text{ t. } g \cdot g^{-1} \cdot g = e = g \cdot g^{-1}$.*

Définition 1.5.2. *(Issue du Cohen-Tannoudji, ch. VI) Une rotation géométrique est une **transformation** dans l'espace tridimensionnel qui conserve un point, les angles, les distances ainsi que le sens des trièdres².*

Les rotations sont d'une importance particulière en physique, car de nombreux objets, pas seulement les vecteurs de l'espace tridimensionnel, se transforment sous l'action d'une rotation. Ainsi, nous généralisons la notion de rotation à l'appartenance à un groupe, le **groupe des rotations**.

Le groupe des rotations, noté $SO(3)$ sera amplement étudié dans les cours de maths, et de mécanique quantique de BA3, mais nous pouvons intuitivement accepter que les rotations constituent en effet un groupe, de par leur loi de composition interne et associative, l'existence d'un neutre (la rotation identité) et d'une rotation inverse.

Pour le formaliser, il reste à insister sur la conservation de la norme. Ainsi, les rotations seront généralisées à des "éléments du groupe des rotations", et les éléments de ce groupe pourront être représentés par des matrices **orthogonales**. Prenons le cas classique et nous obtenons des matrices orthogonales 3×3 .

$$R \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \quad | \quad R^T R = \mathbb{I}$$

Une rotation est paramétrée par

- \vec{n} , l'axe de rotation (vecteur unitaire) ;
- θ , l'angle de rotation.

On note $R(\theta, \vec{n})$ la rotation (dans le sens antihorlogique) autour de l'axe \vec{n} , d'un angle θ . Dans l'espace tridimensionnel, $\vec{n} \in \mathbb{R}^3$, et nous avons les matrices suivantes, bien connues, implémentant les rotations autour des trois axes usuels. Elles peuvent être notées d'une autre manière, introduisant les matrices L_x, L_y, L_z (qui auront une importance particulière par la suite).

2. Pour exclure les symétries du plan

$$R(\theta, \vec{I}_x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} = \exp(i\theta L_x), \quad L_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix}$$

$$R(\theta, \vec{I}_y) = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} = \exp(i\theta L_y), \quad L_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$R(\theta, \vec{I}_z) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \exp(i\theta L_z), \quad L_z = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

D'une manière générale, nous pouvons écrire

$$R(\theta, \vec{n}) = \exp(i\theta \vec{n} \cdot \vec{L}) \quad \text{où } \vec{n} \cdot \vec{L} = n_x L_x + n_y L_y + n_z L_z. \quad (.33)$$

$$= \mathbb{I} + i\theta \vec{n} \cdot \vec{L} + O(\theta^2) \quad (.34)$$

L'introduction de ces opérateurs L_i est très intéressante car en théorie des groupes, lorsque nous pouvons écrire .34, nous disons que les opérateurs L_x, L_y, L_z sont les **générateurs du groupe des rotations**. L'interprétation en est facile : prenons par exemple une rotation autour de l'axe \vec{I}_x d'un angle infinitésimal $d\theta$.

$$R(d\theta, \vec{I}_x) = \mathbb{I} + iL_x d\theta \quad \text{au premier ordre}$$

La rotation diffère de l'opérateur identité d'un facteur $d\theta$ au coefficient L_x au premier ordre. L_x est alors dit un "générateur infinitésimal", et en théorie des groupes, dans un groupe de Lie³, l'étude des générateurs infinitésimaux suffit à reconstruire tout le groupe.

Relations de commutation du groupe des rotations : algèbre du groupe

Les relations de commutation sont centrales dans tout groupe. Ici, avec les générateurs que nous avons introduits, nous pouvons mettre en avant les relations de commutation suivantes :

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= iL_z \\ [L_z, L_x] &= iL_y \\ [L_y, L_z] &= iL_x \end{aligned} \quad ,$$

ou, de manière abrégée :

$$\boxed{[L_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk} L_k} \quad (.35)$$

Les relations de commutation .35 définissent l'**algèbre de Lie** du groupe $SO(3)$ ⁴.

Interprétation des relations de commutation

je ne réussis pas à obtenir les mêmes termes, et je ne comprends pas l'interprétation. J'ai trouvé un équivalent en mécanique classique dans le Cohen-Tannoudji.

$$\begin{aligned} R(-\theta, y)R(-\theta, x)R(\theta, y)R(\theta, x) &= \mathbb{I} + \theta^2 [L_x, L_y] + O(\theta^3) \\ &= R(\theta^2, L_z) \quad \text{à l'ordre } \theta^2 \end{aligned}$$

1.5.2 Représentations du groupe des rotations

Nous avons vu à la section précédente l'action d'une rotation sur l'espace euclidien tridimensionnel. Seulement, comme déjà mentionné, en physique, les vecteurs ne sont pas les seuls objets pouvant se transformer par une rotation : c'est ce qui motive l'utilisation du groupe des rotations en général plutôt que les matrices

3. Voir définition dans le cours de maths

4. Ou de manière équivalente, l'algèbre de commutation des générateurs infinitésimaux du groupe.

$R \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ qui représentent les rotations dans l'espace.

Ainsi, de manière générale, le groupe des rotations aura plusieurs représentations, l'important étant de retrouver les relations de commutation .35.

Définition 1.5.3. Une représentation de l'algèbre de Lie du groupe des rotations est un ensemble de matrices J_i , de taille $n \times n$ a priori arbitraire, satisfaisant les relations de commutation

$$[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} J_k$$

En mécanique quantique, une représentation de $SO(3)$ permet d'implémenter les transformations de rotation de la manière suivante :

$$|\psi\rangle \xrightarrow{R(\theta, \vec{n})} \exp(i\theta \vec{n} \cdot \vec{J}) |\psi\rangle \quad (.36)$$

Un exemple de représentation est l'équivalent quantique du moment angulaire $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ (en reprenant la notation \vec{J}) :

$$\begin{aligned} J_x &= yP_z - zP_y \\ J_y &= zP_x - xP_z \\ J_z &= xP_y - yP_x \end{aligned}$$

Cette section a servi à introduire le **groupe des rotations** : la notion de groupe, de générateur, de représentation. Grâce à cela, nous aboutissons à une définition très générale des opérateurs qui implémentent une transformation de rotation.

A présent, nous allons utiliser le formalisme introduit, principalement les relations de commutation, pour étudier davantage les rotations en mécanique quantique.

1.5.3 Invariance par rotation

Un système physique S est par définition **invariant par rotation** si en lui appliquant à un moment donné une rotation quelconque \mathcal{R} et que nous appliquons la même rotation à tous les systèmes ou appareils qui peuvent influencer sur lui, ses propriétés et son comportement ne sont pas modifiés.

En particulier, l'invariance par rotation en mécanique quantique veut dire entre autres que l'évolution d'un système se déroule de la même manière que s'il avait préalablement été sujet à une rotation. En pratique :

- L'évolution dans le temps est décrite par l'équation de Schrödinger, et indique que $|\psi(t)\rangle = e^{-itH} |\psi(0)\rangle$
- Une rotation est générée par le moment cinétique du système, \vec{J} (voir (.36) pour l'implémentation de cette transformation)

Ainsi, en mécanique quantique, un système est invariant par rotation si

$$\underbrace{e^{-itH}}_{\text{Evol. temps}} \underbrace{e^{i\theta \vec{n} \cdot \vec{J}}}_{\text{Rotation}} |\psi\rangle = e^{i\theta \vec{n} \cdot \vec{J}} e^{-itH} |\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle, \vec{n}, \theta, t$$

Et cette condition doit être vraie pour tout θ et t , que l'on peut prendre arbitrairement petits, pour obtenir la condition

$$[H, J_x] = [H, J_y] = [H, J_z] = 0 \quad (.37)$$

Je ne suis pas sûr du calcul qui mène à cela. J'arrive à $[H, J_x] + [H, J_y] + [H, J_z] = 0$ et je ne vois pas comment affirmer la condition ci-dessus

Qui correspond à une traduction de l'invariance par rotation : il faut et suffit que H commute avec les opérateurs de rotations infinitésimales, qui correspondent aux trois composantes du moment cinétique total \vec{J} du système.

Conséquences de l'invariance par rotation

L'invariance par rotation implique la **conservation du moment angulaire**. Montrons-le en deux temps :

1. Si $|\psi(t)\rangle$ est solution de l'équation de Schrödinger $i\partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle$, alors

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | J_x | \psi(t) \rangle &= \langle \psi(0) | e^{itH} J_x e^{-itH} | \psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | J_x | \psi(0) \rangle, \end{aligned}$$

étant donné que J_x et $e^{\pm it H}$ commutent (vu que H et J_x commutent) **je ne suis pas sûr de cette justification**. La relation que nous venons d'obtenir montre que si J_x est une observable, **sa valeur moyenne dans l'état ψ est constante à travers le temps**.

2. Si $|\psi\rangle$ est vecteur propre de J_x :

$$J_x |\psi\rangle = j |\psi\rangle$$

Alors, $|\psi(t)\rangle = \exp(-it H) |\psi\rangle$ est aussi un vecteur propre de J_x , avec la même valeur propre :

$$\begin{aligned} J_x |\psi(t)\rangle &= J_x e^{-it H} |\psi\rangle \\ &= e^{-it H} J_x |\psi\rangle \\ &= e^{-it H} j |\psi\rangle \\ &= j e^{-it H} |\psi\rangle \\ &= j |\psi(t)\rangle \end{aligned}$$

Ce dernier résultat est important car les valeurs propres et les états propres d'une observable sont les résultats et les états possibles après une mesure de la grandeur physique correspondant à cette observable. Ici, en prouvant ce point, nous prouvons que l'évolution dans le temps n'impacte pas la mesure du moment angulaire de la particule.

Ces deux conséquences immédiates montrent que la **grandeur conservée** par l'**invariance par rotation** est le **moment angulaire** (ses trois composantes).

1.5.4 Quantification du moment angulaire

Le résultat dont nous allons discuter dans cette section est une **quantification du moment angulaire**, comme nous avons eu quantification de l'énergie dans des problèmes précédents. Concrètement, la structure de groupe, par exemple la relation de commutation

$$[J_x, J_y] = iJ_z$$

impose en réalité des conditions sur les valeurs propres de l'observable J_z .

Théorème 1.5.4. *Les relations de commutation $[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} J_k$ impliquent que les valeurs propres de J_k sont demi-entières :*

$$J_k |\psi\rangle = m |\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad m = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$$

Ce résultat sera prouvé dans le cours de BA3.

1.5.5 Exemple de représentation – Matrices de Pauli

En introduisant le groupe des rotations, nous avons introduit la définition d'une représentation de ce groupe : un ensemble de matrices satisfaisant les relations de commutation .35. Ici, nous présentons un exemple de représentation avec des matrices 2×2 : les **matrices de Pauli**.

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} & \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ J_x &= \frac{1}{2} \sigma_x & J_y &= \frac{1}{2} \sigma_y & J_z &= \frac{1}{2} \sigma_z \end{aligned}$$

Nous pouvons vérifier les relations de commutation (notamment en vérifiant que $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk} \sigma_k$), et d'autres relations :

- $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2 \delta_{ij} \mathbb{I}$
- $\text{Tr}(\sigma_i) = 0 \quad \forall i$
- $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{I} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k$

Valeurs propres et vecteurs propres des J_i

Les matrices de Pauli sont de valeurs propres ± 1 , et donc les moments cinétiques ont des valeurs possibles de $\pm 1/2$ (cf. Postulat de la mesure et définition des L_i en fonction des σ_i). Les vecteurs propres associés sont

$$\begin{aligned} |\psi_{x+}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} & \left| \psi_{x-}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ |\psi_{y+}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} & \left| \psi_{y-}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \\ |\psi_{z+}\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle & \left| \psi_{z-}\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Pour une application concrète, considérons le vecteur unitaire associé aux coordonnées sphériques

$$\vec{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta) ,$$

et étudions le moment cinétique (représenté par $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$) selon cette direction.

$$J_n = \vec{n} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (.38)$$

Ainsi,

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

est vecteur propre de cet opérateur, de valeur propre $+1$. Nous pouvons réécrire, dans la base des vecteurs up and down,

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} |\downarrow\rangle \quad (.39)$$

Il est légitime de se demander à ce stade l'importance d'une telle écriture. Bien entendu, l'intuition n'est pas immédiate, mais cette écriture reste importante pour la raison qui suit. Les *systèmes à deux niveaux* (où $\dim \mathcal{H} = 2$) sont très intéressants en pratique (ils sont au cœur de l'informatique quantique, par exemple).

Insérer une interprétation de cette équation : la sphère de Bloch

┌ Certaines particules élémentaires (e^- , p^+ , n) ont un spin $1/2$. Elles ont un espace de Hilbert de dimension 2 qui se transforme comme $\exp(i\theta/2 \vec{n} \cdot \vec{\sigma})$.

Remarque sur les unités

Dans cette section, nous avons travaillé en unités réduites $\hbar = 1$. Dans les unités usuelles, en notant $\tilde{L}_x, \tilde{L}_y, \tilde{L}_z$ les vrais moments angulaires, les opérateurs utilisés dans cette sections étaient les opérateurs sans dimension

$$L_x = \frac{\tilde{L}_x}{\hbar} \quad L_y = \frac{\tilde{L}_y}{\hbar} \quad L_z = \frac{\tilde{L}_z}{\hbar} .$$

(\hbar et \vec{L} ont les mêmes dimensions)

Donc une rotation d'angle θ autour de l'axe O_x est implémentée par l'opérateur

$$\exp(i\theta L_x) = \exp\left(i\frac{\theta \tilde{L}_x}{\hbar}\right) ,$$

et les relations de commutation deviennent

$$[L_x, L_y] = iL_z \longrightarrow [\tilde{L}_x, \tilde{L}_y] = i\hbar \tilde{L}_z$$

Remarque sur les symétries et la conservation de grandeurs

Le théorème de Nöther exprime que toute symétrie dans le comportement d'un système implique la conservation d'une grandeur physique. Ici, l'invariance par rotation implique la conservation du moment cinétique. Les mêmes considérations s'appliquent aussi à l'invariance par translation et la conservation de l'impulsion : nous verrons ça au chapitre suivant.