

— ARTEQ —
TRAVAUX DIRIGÉS

Mécanique quantique

JEAN-FRANÇOIS ROCH
jean-francois.roch@ens-paris-saclay.fr

LÉA LACHAUD
lea.lachaud@ens-paris-saclay.fr

19 septembre 2022



Table des matières

1	Polarisation du photon	1
1.1	Polarisation de la lumière	1
1.2	Effet d'un polariseur	1
1.3	Mesures de polarisation et lame à retard	2
1.4	Succession de filtres polariseurs (facultatif)	2
1.5	Formalisme de Dirac	3
1.6	Formalisme de Dirac et polarisation de la lumière	4
1.7	Espérance mathématique (facultatif)	4
2	Un peu de formalisme	5
2.1	Opérateurs adjoints et opérateurs hermitiens	5
2.2	Propriétés de commutation	5
2.3	Opérateurs et transformations unitaires	5
2.4	Quelques exemples d'opérateurs	6
3	Systèmes à deux niveaux	7
3.1	Généralités	7
3.2	Mesure quantique sur un système à deux niveaux	8
3.3	La molécule d'ammoniac	8
4	Interaction dipolaire	11
5	Puits de potentiel, courant de probabilité et effet tunnel	13
5.1	Puits de potentiel fini, carré - États liés	13
5.2	Puits de potentiel fini, carré - États libres ($E > 0$)	14
5.3	Courant de probabilité	14
5.4	Effet tunnel	15
6	Commutation des observables et symétries	17
6.1	Commutation	17
6.2	Symétries et loi de conservation	17
7	Oscillateurs harmoniques quantiques	19
7.1	Quantification « à la Dirac »	19
7.2	États de Fock	20
7.3	Fonctions d'onde pour les premiers états de Fock	22
8	Évolution des systèmes quantiques	25
8.1	Couplage de deux spins	25
8.2	Transition entre états d'un spectre discret	26
8.3	Mesure du rapport gyromagnétique du neutron	27
9	Inégalité de Leggett-Garg	29
9.1	Le chat de Schrödinger	29
9.2	L'inégalité de Leggett-Garg	32

– TD n°1 –

Polarisation du photon

1.1 Polarisation de la lumière

Le champ électrique d'une onde plane qui se propage dans la direction de l'axe z s'écrit :

$$\vec{E}(z,t) = \frac{E_0}{2} (\cos \theta \vec{e}_x + \sin \theta e^{i\phi} \vec{e}_y) e^{i(kz - \omega t)} + c.c. \quad (1.1)$$

où \vec{e}_x et \vec{e}_y sont unitaires et $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$. La polarisation de l'onde – ou du photon unique – est décrite par un vecteur unitaire :

$$\vec{e}_p = \cos \theta \vec{e}_x + \sin \theta e^{i\phi} \vec{e}_y. \quad (1.2)$$

1. Écrire le vecteur \vec{e}_p pour un photon de polarisation rectiligne.
2. Écrire le vecteur \vec{e}_p pour un photon de polarisation circulaire gauche et pour un photon de polarisation circulaire droite. Montrer que les expressions obtenues sont invariantes par rotations des axes Ox et Oy autour de l'axe Oz (à un facteur de phase près sans importance).
3. Pourquoi peut-on sans perte de généralité se limiter à $\theta \in [0; \pi/2]$ et $\phi \in [0; 2\pi[$ dans l'équation (1.2) ? Ceci suggère de représenter l'état de polarisation \vec{e}_p par un point sur une sphère de rayon unité ayant pour coordonnées sphériques 2θ et ϕ . Cette représentation est appelée *sphère de Bloch*. Quels sont les états de polarisation associés aux deux pôles ? Quelle partie de la sphère de Bloch est associée aux polarisations linéaires ? Où se trouvent les deux polarisations circulaires sur la sphère de Bloch ?

1.2 Effet d'un polariseur

Un filtre polarisant est une feuille de matière synthétique employée pour polariser la lumière. Le filtre transmet la lumière avec une polarisation parallèle à un axe donné – appelé *axe du polariseur* – et absorbe celle dont la polarisation est orthogonale à cet axe.

Considérons d'abord un faisceau de lumière d'intensité I_0 ayant une polarisation rectiligne qui fait un angle θ avec la direction Ox . Si le faisceau rencontre un polariseur dont l'axe fait un angle α avec l'axe Ox , l'intensité transmise est donnée par la loi de Malus :

$$I_0 \cos^2(\theta - \alpha).$$

Décrivons cela en termes de photons – qui sont, rappelons-le, des particules insécables. Lorsqu'un photon arrive sur un polariseur, quel que soit son état de polarisation, ou bien il passe, ou bien il ne passe pas. Si le photon passe, la polarisation est rectiligne et parallèle à l'axe du polariseur. Ainsi, la loi de Malus en termes de photons uniques s'énonce comme suit :

« Un photon a une probabilité $\cos^2(\theta - \alpha)$ de traverser le polariseur. »

Plus généralement, la probabilité qu'un photon soit transmis par le polariseur est $|\vec{e}_p \cdot \vec{e}_\alpha|^2$, où \vec{e}_α est le vecteur unitaire parallèle à l'axe du polariseur.

4. Donner la probabilité qu'un polariseur dont l'axe de transmission fait un angle α avec l'axe x transmette un photon avec la polarisation \vec{e}_p de l'équation (1.2). Utiliser le résultat pour retrouver la probabilité de transmission pour un photon de polarisation rectiligne et pour un photon de polarisation circulaire.

Indice : on utilisera les identités trigonométriques ci-dessous.

$$\begin{aligned}\cos \alpha \cos \beta &= \frac{1}{2} (\cos(\alpha + \beta) + \cos(\alpha - \beta)) \\ \sin \alpha \sin \beta &= -\frac{1}{2} (\cos(\alpha + \beta) - \cos(\alpha - \beta))\end{aligned}$$

1.3 Mesures de polarisation et lame à retard

On considère une expérience dans laquelle on peut préparer un grand nombre de photons avec la même polarisation.

5. La polarisation est inconnue et on essaie de la déterminer en utilisant seulement un filtre polariseur et un détecteur de photons idéal.
- (a) Quelles informations peut-on obtenir après avoir envoyé un seul photon sur le filtre polariseur ?
 - (b) Quelles informations peut-on obtenir en envoyant plusieurs photons sur le même polariseur ?
 - (c) Quelles informations peut-on obtenir si on tourne l'axe du polariseur ?
 - (d) Est-il possible de déterminer la chiralité droite ou gauche dans le cas d'une polarisation circulaire ?
6. Une lame à retard est un outil optique capable de modifier la polarisation de la lumière la traversant ; cet effet vient de la biréfringence du cristal constituant la lame. Dans cette question, nous considérons une lame quart d'onde, qui change la polarisation des photons qui la traversent selon la loi suivante :

$$\vec{e}_p = \cos \theta \vec{e}_x + \sin \theta e^{i\phi} \vec{e}_y \rightarrow \cos \theta \vec{e}_x + \sin \theta e^{i(\phi + \frac{\pi}{2})} \vec{e}_y. \quad (1.3)$$

- (a) Peut-on considérer la transmission par une lame à retard comme un processus de mesure ?
- (b) Montrer qu'en utilisant une lame à retard, un polariseur et un détecteur de photons, il est possible de déterminer si une polarisation circulaire a une chiralité droite ou gauche.

1.4 Succession de filtres polariseurs (facultatif)

On étudie une succession de N filtres polariseurs, dont les plans sont orthogonaux au même axe z ; la direction de l'axe de transmission du n -ème filtre est spécifiée par l'angle α_n qu'il fait avec l'axe x .

7. Donner la probabilité qu'un photon ayant une polarisation rectiligne selon l'axe x soit transmis par tous les filtres dans le cas où $\alpha_n = \frac{n}{N} \frac{\pi}{2}$ ($n = 1, 2, \dots, N$). Étudier les cas $N = 1$, $N = 2$, $N = 90$ et $N \rightarrow \infty$.
8. Répéter le calcul pour un photon initialement dans un état de polarisation circulaire.

1.5 Formalisme de Dirac

1.5.1 Calcul formel en notation de Dirac

Associativité Soit λ un scalaire, $|u\rangle, |v\rangle, |w\rangle$ des états physiques, on notera :

$$\hat{A} = |u\rangle\langle v|, \quad \hat{B} = |w\rangle\langle u| \quad \text{et} \quad \hat{C} \text{ un opérateur quelconque.}$$

9. Vérifier que \hat{A} et \hat{B} sont des opérateurs puis calculer les produits $\hat{A}\hat{B}$ et $\hat{B}\hat{A}$.

10. Donner la nature (scalaire, vecteur ou opérateur) des objets suivants :

- $\hat{C}|u\rangle$
- $\langle v|\lambda\hat{C}|w\rangle$
- $\hat{A}\langle u|v\rangle\langle w|u\rangle$
- $\hat{A}\hat{C}\lambda\hat{B}$

Conjugaison Soit λ un scalaire, $|u\rangle, |v\rangle, |w\rangle$ des états physiques, \hat{A} un opérateur. La conjuguée hermitique d'une séquence donnée s'obtient en prenant la séquence dans l'ordre inverse, et en remplaçant chaque terme par son conjugué, suivant la correspondance suivante :

$$\lambda \longleftrightarrow \bar{\lambda}, \quad |x\rangle \longleftrightarrow \langle x|, \quad \hat{A} \longleftrightarrow \hat{A}^\dagger.$$

11. Calculer la conjuguée des objets suivants et préciser leur nature :

- $\hat{A}|u\rangle$
- $\hat{A}|u\rangle\langle v|\lambda i$
- $|u\rangle\langle v|\hat{A}|w\rangle\langle x|\lambda i|y\rangle\langle z|$

1.5.2 Changement de représentation

Polarisation de la lumière Soit $|H\rangle, |V\rangle$ une base canonique de l'espace de Hilbert qui décrit la polarisation de la lumière. Dans cette base, la représentation matricielle de $|H\rangle$ et $|V\rangle$ est :

$$|H\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |V\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.4)$$

On définit les états $|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + |V\rangle)$ et $|\beta\rangle = \frac{i}{2}|H\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}|V\rangle$.

12. Donner la représentation matricielle de $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ et $\langle\beta|$.

13. Donner la représentation matricielle de $|\phi\rangle = \frac{1}{3}|\alpha\rangle - i\frac{\sqrt{8}}{3}|\beta\rangle$.

14. Donner la représentation matricielle de $|\alpha\rangle\langle\beta|$.

Systèmes à trois niveaux Soit $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ une base canonique d'un espace à trois dimension. La représentation matricielle de ces vecteurs est donc :

$$|1\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |2\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |3\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

On définit les états $|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$ et $|v\rangle = \frac{1}{2}(|1\rangle - |2\rangle) + \frac{i}{\sqrt{2}}|3\rangle$.

15. Donner la représentation matricielle de $|u\rangle, \langle u|$ et $|v\rangle$.

16. Donner la représentation matricielle de $|\phi\rangle = \frac{1}{2}|u\rangle + i\frac{\sqrt{3}}{2}|v\rangle$.

17. Donner la représentation matricielle de $|u\rangle\langle v|$.

1.6 Formalisme de Dirac et polarisation de la lumière

L'état de polarisation du photon peut être décrit par un élément d'un espace de Hilbert à deux dimensions \mathcal{H} . On considère $\{|H\rangle, |V\rangle\}$, une base orthonormale de \mathcal{H} . L'état $|H\rangle$ correspond à une polarisation horizontale et l'état $|V\rangle$ à une polarisation verticale. Les états de polarisation possibles pour le photon peuvent s'écrire

$$|\psi\rangle = a|H\rangle + b|V\rangle; \quad a, b \in \mathbb{C}.$$

18. Sachant que $|\psi\rangle$ est normalisée, montrer que tous les états de polarisation peuvent être paramétrisés à l'aide des deux angles θ et ϕ de la façon suivante :

$$|\psi(\theta, \phi)\rangle = \cos\theta|H\rangle + \sin\theta e^{i\phi}|V\rangle, \quad \theta \in [0, \pi/2], \quad \phi \in [0, 2\pi]$$

19. Un polariseur orienté dans une direction qui fait un angle α avec l'horizontale est représenté par l'observable \hat{P}_α :

$$\hat{P}_\alpha = |\psi(\alpha, 0)\rangle\langle\psi(\alpha, 0)|.$$

- (a) On suppose que le photon est dans l'état $|H\rangle$ et on mesure l'observable \hat{P}_α . Quels sont les résultats possibles de la mesure ? À quelles situations physiques correspond chacun de ces résultats ? Quelle est la probabilité d'obtenir chacun des résultats de la mesure ? Quel est l'état de polarisation du photon après la mesure ?
- (b) Déterminer la représentation matricielle de \hat{P}_α dans la base $\{|H\rangle, |V\rangle\}$. Déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres de la matrice. Discuter vos résultats.
- (c) Le photon étant dans l'état $|H\rangle$, on mesure l'observable $\hat{P}_{\frac{\pi}{2}}$. Quel est le résultat ?

1.7 Espérance mathématique (facultatif)

Un train de photons identiques possédant une polarisation rectiligne faisant un angle θ avec l'axe Ox est envoyé sur un polariseur, dont l'axe fait un angle α avec l'axe Ox . La détection de chaque photon transmis est une *variable aléatoire* $X_{\alpha, \theta} \in \{0, 1\}$: la probabilité qu'un photon soit détecté et que la variable aléatoire prenne la valeur 1 est $p = \cos^2(\alpha - \theta)$; la probabilité qu'un photon ne soit pas détecté et que la variable aléatoire prenne la valeur 0 est $1 - p$.

- 20. L'espérance mathématique d'une variable aléatoire discrète X qui prend la valeur λ avec la probabilité p_λ est $\mathbb{E}[X] = \sum_\lambda \lambda p_\lambda$. Donner la valeur de l'espérance mathématique de $X_{\alpha, \theta}$ et lui attribuer une interprétation physique.
- 21. La variance d'une variable aléatoire discrète X est $\Delta[X] = \mathbb{E}[X^2] - \mathbb{E}[X]^2 = \sum_\lambda \lambda^2 p_\lambda - (\sum_\lambda \lambda p_\lambda)^2$. Donner la valeur de $\Delta[X_{\alpha, \theta}]$ et lui attribuer une interprétation physique.
- 22. Comment peut-on utiliser la notation de Dirac pour calculer de façon simple $\mathbb{E}[X_{\alpha, \theta}]$ et $\Delta[X_{\alpha, \theta}]$?

– TD n°2 –

Un peu de formalisme

2.1 Opérateurs adjoints et opérateurs hermitiens ¹

Soit \hat{A} un opérateur agissant sur un ket quelconque $|\psi\rangle$ de l'espace de Hilbert étudié. On définit son adjoint \hat{A}^\dagger par ²

$$|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \iff \langle\psi'| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger$$

1. Montrer que l'on a $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$ et $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$.
2. Montrer qu'un opérateur hermitien ($\hat{A}^\dagger = \hat{A}$) ne possède que des valeurs propres réelles et que lorsque \hat{A} est un opérateur quelconque, $(\hat{A}^\dagger\hat{A})$ ne possède que des valeurs propres positives.
3. Soit \hat{L} un opérateur quelconque, que peut-on dire des opérateurs $\hat{L} + \hat{L}^\dagger$ et $i(\hat{L} - \hat{L}^\dagger)$?

2.2 Propriétés de commutation

4. Soient \hat{A}, \hat{B} et \hat{C} trois opérateurs, montrer les identités suivantes :

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{B} [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}] \hat{C} \quad ; \quad [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A} [\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}] \hat{B} \\ [\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \quad ; \quad [\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger] \end{aligned}$$

5. Dans l'hypothèse où $[\hat{A}, \hat{C}] = 0$ et $[\hat{B}, \hat{C}] = 0$ a-t-on toujours $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$?
6. Soient \hat{A} et \hat{B} deux opérateurs, tous deux commutants avec leur commutateur.

- (a) Montrer que $[\hat{A}, \hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1} [\hat{A}, \hat{B}]$ et $[\hat{A}^n, \hat{B}] = n\hat{A}^{n-1} [\hat{A}, \hat{B}]$.
- (b) Soit $f(z)$ une fonction de la variable complexe z définie par $f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$.
On définit l'opérateur $f(\hat{A})$ par la série $f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{A}^n$.
Montrer que

$$[\hat{A}, f(\hat{B})] = f'(\hat{B}) [\hat{A}, \hat{B}] \quad .$$

2.3 Opérateurs et transformations unitaires

Un opérateur \hat{U} est unitaire si il vérifie $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \mathbb{1}$. On définit une transformation unitaire par l'action de \hat{U} sur un ket quelconque : $|\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle$.

7. Montrer qu'une transformation unitaire préserve le produit scalaire.
8. Soit \hat{A} un opérateur hermitien, montrer que l'opérateur $e^{i\hat{A}}$ est unitaire.

1. Les opérateurs hermitiens sont aussi appelés opérateurs hermitiques ou encore opérateurs auto-adjoints
2. \hat{A}^\dagger est aussi appelé le conjugué hermitique de \hat{A} .

9. On définit la transformation d'un opérateur \hat{A} par

$$|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \iff |\phi'\rangle = \hat{A}'|\psi'\rangle$$

où $|\phi'\rangle = \hat{U}|\phi\rangle$ et $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$. Comment s'exprime \hat{A}' en terme de \hat{A} ?

10. Montrer que deux vecteurs propres d'un opérateur unitaire ayant des valeurs propres différentes sont orthogonaux. Quelles sont les valeurs propres d'un opérateur à la fois unitaire et hermitien?

2.4 Quelques exemples d'opérateurs

11. **Opérateurs \hat{X} et \hat{P}** : on rappelle que \hat{X} et \hat{P} sont hermitiques et que

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$$

Montrer que les opérateurs $\frac{1}{2}(\hat{X}^2\hat{P} + \hat{P}\hat{X}^2)$ et $\hat{X}\hat{P}\hat{X}$ sont égaux et hermitiques.

12. **Opérateur d'évolution** : on définit l'opérateur d'évolution $\hat{U}(t, t_0)$ par

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}(t - t_0)}{\hbar}\right).$$

- (a) Pour quelle raison peut-on décrire l'évolution dans le temps d'un état à l'aide d'une transformation unitaire?
- (b) Montrer que \hat{U} est unitaire.
- (c) Soit $|\psi(t_0)\rangle$ l'état du système à l'instant t_0 . Exprimer $|\psi(t)\rangle$ à l'aide de $\hat{U}(t, t_0)$ et $|\psi(t_0)\rangle$.
13. **Translation** : développer en série entière la fonction d'onde $\psi(x + a)$ autour du point x . En déduire que l'opérateur de translation de vecteur \vec{a} s'écrit :

$$\hat{\mathcal{T}}_{\vec{a}} = \exp\left(\frac{i\vec{\hat{P}} \cdot \vec{a}}{\hbar}\right).$$

Calculer $\hat{\mathcal{T}}_{\vec{a}} \vec{\hat{R}} \hat{\mathcal{T}}_{\vec{a}}^\dagger$ et $\hat{\mathcal{T}}_{\vec{a}} \vec{\hat{P}} \hat{\mathcal{T}}_{\vec{a}}^\dagger$.

14. **Parité** : on définit l'opérateur $\hat{\Pi}$ par son action sur les vecteurs de base $|x\rangle$ avec

$$\hat{\Pi}|x\rangle = |-x\rangle$$

- (a) Montrer que $\hat{\Pi}$ est hermitique et unitaire. Donner les valeurs propres et fonctions propres de $\hat{\Pi}$.
- (b) Chercher les expressions des opérateurs de projection \hat{P}_\pm sur les états pairs et impairs en fonction de $\hat{\Pi}$.
- (c) Calculer $\hat{\Pi}\hat{X}\hat{\Pi}^\dagger$ et $\hat{\Pi}\hat{P}\hat{\Pi}^\dagger$.

- (d) On considère un système décrit par le hamiltonien $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{X})$.

Montrer que si $V(x)$ est une fonction paire alors $[\hat{H}, \hat{\Pi}] = 0$. Conclusion.

15. **Projecteur** : on considère une base orthonormée $\{|u_i\rangle\}_{i=1\dots N}$ et l'opérateur

$$\hat{\mathcal{P}}_q = \sum_{i=1}^q |u_i\rangle\langle u_i| \quad \text{avec } q < N.$$

Montrer que $\hat{\mathcal{P}}_q^2 = \hat{\mathcal{P}}_q$ et que $\hat{\mathcal{P}}_q$ projette tout ket sur le sous espace défini par les vecteurs de base $\{|u_i\rangle\}_{i=1\dots q}$.

– TD n°3 –

Systèmes à deux niveaux

On appelle *système à deux niveaux* un système quantique dont les états peuvent être décrits par les vecteurs d'un espace de Hilbert de dimension 2.

3.1 Généralités

On considère un système dont le hamiltonien peut s'écrire $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, avec

$$\hat{H}_0 = E_0|0\rangle\langle 0| + E_1|1\rangle\langle 1| \quad ; \quad \hat{V} = W|1\rangle\langle 0| + W'|0\rangle\langle 1|.$$

La base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ est une base orthonormée de \mathcal{H} .

1. Représenter les opérateurs \hat{H} , \hat{H}_0 et \hat{V} sous forme de matrices dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$.
2. Montrer que E_0 et E_1 sont réels et que W' est le conjugué de W , noté W^* .
3. On introduit les notations suivantes :

$$E_m = \frac{1}{2}(E_0 + E_1) \quad ; \quad \Delta = E_1 - E_0 \quad ; \quad \hat{H} = E_m \hat{\mathbb{1}} + \hat{K}$$

où $\hat{\mathbb{1}}$ est l'opérateur identité sur \mathcal{H} et \hat{K} est un opérateur dont on donnera la représentation matricielle dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$.

Sans les calculer, montrer que les vecteurs propres de \hat{K} sont les mêmes que les vecteurs propres de \hat{H} .

4. Exprimer les valeurs propres E_{\pm} de \hat{H} en fonction de celles κ_{\pm} de \hat{K} .
5. Pourquoi peut-on choisir $E_m = 0$ sans perte de généralité ? Ce choix sera fait dans toute la suite.
6. Donner les expressions des valeurs propres κ_{\pm} de \hat{K} en fonction de Δ et $|W|$ (on prendra $\kappa_+ \geq 0$). En déduire l'expression des valeurs propres E_{\pm} de \hat{H} .
7. Étudier le comportement de E_{\pm} dans les deux cas limites : couplage faible $|W| \ll |\Delta|$ et couplage fort $|W| \gg |\Delta|$.
8. Tracer les graphes de E_{\pm} en fonction de Δ pour un W fixé, et en fonction de $|W|$ pour Δ fixé.
9. Soient θ et φ deux angles définis de la façon suivante :

$$\tan \theta = -\frac{2|W|}{\Delta} \quad \theta \in [0, \pi[; \quad W = |W|e^{i\varphi} \quad \varphi \in [0, 2\pi[$$

Donner l'expression de la matrice représentant \hat{K} en fonction de Δ et des angles θ et φ .

10. Donner l'expression des vecteurs propres $|\pm\rangle$ normés associés aux valeurs propres E_{\pm} de \hat{H} , dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ en fonction des angles θ et φ . On pourra introduire l'angle $\frac{\theta}{2}$ pour simplifier les expressions.
11. Étudier le comportement des vecteurs propres $|\pm\rangle$ dans les deux cas limites de couplage faible ($|W| \ll |\Delta|$) et de couplage fort ($|W| \gg |\Delta|$).

12. Montrer que ces vecteurs propres peuvent être représentés sur une sphère de Bloch (concept défini en question 3 du TD n°1). Où se trouvent les vecteurs propres dans la limite du couplage fort ? faible ?

3.2 Mesure quantique sur un système à deux niveaux

On considère un système quantique décrit par un espace de Hilbert \mathcal{H} de dimension 2, caractérisé par son hamiltonien \hat{H} ainsi qu'une observable \mathcal{A} , d'opérateur associé \hat{A} . La représentation matricielle de \hat{H} et \hat{A} dans une base orthonormée $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ s'écrit

$$\hat{H} = E_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \hat{A} = a \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

où E_0 et a sont deux paramètres réels positifs.

13. On suppose que le système est dans l'état

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$$

Si l'on mesure \mathcal{A} , quel résultat est-on certain d'obtenir ? Quel est l'état $|\psi_1\rangle$ du système juste après la mesure ?

14. Si l'on mesure l'énergie juste après la mesure de \mathcal{A} (sachant que le système est maintenant dans $|\psi_1\rangle$), quelles sont respectivement les probabilités d'obtenir comme résultat les valeurs E_0 et $-E_0$?
15. Supposons que le résultat de la mesure précédente soit E_0 . Dans quel état, noté $|\psi_2\rangle$, se trouve le système après la mesure ?
16. Si l'on poursuit par une nouvelle mesure de \mathcal{A} (le système étant alors dans $|\psi_2\rangle$), quelles sont les probabilités d'obtenir a et $-a$?
17. Conclure quant à l'effet d'une mesure de l'énergie sur le système, sachant qu'initialement on était certain du résultat de la mesure de \mathcal{A} .

3.3 La molécule d'ammoniac

La molécule d'ammoniac est constituée de 3 atomes d'hydrogène et d'un atome d'azote. Elle peut émettre des photons dans le domaine microonde, à une longueur d'onde $\lambda = 1,25$ cm. Ce phénomène physique est à la base du maser¹ à ammoniac. Cet exercice propose de relier les propriétés de ces photons à la structure géométrique de la molécule, grâce à un modèle simplifié mettant en œuvre le formalisme du système à deux niveaux en mécanique quantique.

3.3.1 Symétrie par réflexion

Dans une vision semi-classique, les atomes de la molécule s'organisent autour de configurations géométriques stables dans lesquelles les 3 atomes d'hydrogène forment un triangle équilatéral, tandis que l'atome d'azote est situé sur la droite orthogonale au plan du triangle et passant par le centre de ce dernier. La molécule peut donc se trouver dans deux états quantiques possibles, notés $|U\rangle$ et $|D\rangle$, correspondant aux deux positions symétriques de l'atome d'azote de part et d'autre du plan des atomes d'hydrogène (cf. figure 3.1).

On supposera que les états $\{|U\rangle, |D\rangle\}$ forment une base orthonormée. Dans l'espace de Hilbert engendré par cette base, le hamiltonien de la molécule s'exprime de la façon suivante :

$$H = E_0|U\rangle\langle U| + E_1|D\rangle\langle D| + W|U\rangle\langle D| + W^*|D\rangle\langle U|$$

où $E_0, E_1 \in \mathbb{R}$ et $W \in \mathbb{C}$.

1. MASER : Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation

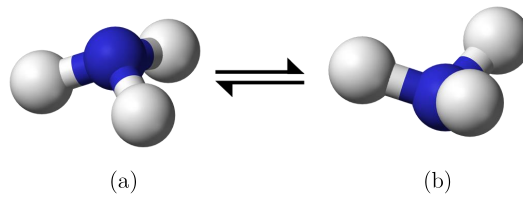


FIGURE 3.1 – **Les conformations de la molécule d’ammoniac.** (a) Conformation « up », notée $|U\rangle$. (b) Conformation « down », notée $|D\rangle$.

18. Soit \hat{T} l’opérateur décrivant la réflexion par rapport au plan des atomes d’hydrogène. Donner l’expression matricielle de \hat{T} dans la base $\{|U\rangle, |D\rangle\}$.
19. L’énergie de la molécule étant invariante par cette opération de symétrie, en déduire des contraintes sur les valeurs de E_0 , E_1 et W .
Indice : on pourra considérer la valeur moyenne de \hat{H} associée à un état $|\psi\rangle$ quelconque, et écrire qu’elle doit être égale à la valeur moyenne de \hat{H} associée à $\hat{T}|\psi\rangle$.
20. Montrer qu’on peut alors écrire \hat{H} comme une matrice à coefficients **réels** :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & W \\ W & 0 \end{pmatrix}, \quad W \in \mathbb{R}. \quad (3.1)$$

21. Déterminer les expressions des vecteurs propres $|+\rangle$ et $|-\rangle$ de \hat{H} dans la base $\{|U\rangle, |D\rangle\}$ ainsi que les valeurs propres associées E_{\pm} .
22. Quelle est l’action de l’opérateur \hat{T} sur les vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$? Quel est le lien entre cette propriété et la contrainte trouvée en question 19 ?
23. La molécule d’ammoniac peut émettre un photon lorsqu’elle passe de l’état $|+\rangle$ à l’état $|-\rangle$. C’est cette transition qui est responsable de l’émission d’un maser à ammoniac. La fréquence du photon est reliée à la différence d’énergie entre les deux états par la formule de Bohr :

$$h\nu_{\text{photon}} = E_+ - E_- \quad (3.2)$$

Calculer la fréquence correspondante et en déduire la valeur de W en eV (on rappelle que $h = 6.63 \times 10^{-34}$ J.s).

3.3.2 Évolution temporelle

On suppose qu’à l’instant initial $t = 0$, la molécule d’ammoniac a été préparée dans l’état $|U\rangle$. On note $|\psi(t)\rangle$ l’état de la molécule à l’instant $t \geq 0$.

24. Donner l’expression de $|\psi(t)\rangle$ dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, puis dans la base $\{|U\rangle, |D\rangle\}$.
25. Donner l’expression de la probabilité $P(t)$ de mesurer la molécule dans l’état $|U\rangle$ à l’instant $t > 0$. On précisera l’observable qui est mesurée.

– TD n°4 –

Interaction dipolaire

On considère deux atomes, A et B , décrits chacun par leurs deux états de plus basses énergies. Les états quantiques de l'atome A seront décrits par les vecteurs de l'espace de Hilbert $\mathcal{H}^{(A)}$ et ceux de l'atome B par les vecteurs de l'espace de Hilbert $\mathcal{H}^{(B)}$. Les espaces de Hilbert $\mathcal{H}^{(A)}$ et $\mathcal{H}^{(B)}$ sont de dimension 2. On note $\hat{H}^{(A)}$ et $\hat{H}^{(B)}$ les hamiltoniens des atomes A et B respectivement.

$$\hat{H}^{(i)} = E_g^{(i)} |g\rangle_i \langle g| + E_e^{(i)} |e\rangle_i \langle e|; \quad i = A, B$$

où $\{|g\rangle_i, |e\rangle_i\}$, est la base orthonormée formée par les deux états de plus basses énergie de l'atome i ($i = A, B$). $E_g^{(i)}$ est l'énergie de l'état fondamental de l'atome i et $E_e^{(i)}$ l'énergie de son premier état excité. On suppose que les deux atomes ont les mêmes niveaux d'énergie, ce qui se traduit par $E_g^{(A)} = E_g^{(B)}$ et $E_e^{(A)} = E_e^{(B)}$. On considère le système quantique S constitué des deux atomes A et B .

1. Déterminer l'espace de Hilbert \mathcal{H} permettant de décrire les états de S . Quelle est sa dimension ? On donnera une base orthonormée de cet espace.
2. On considère que les deux atomes sont assez éloignés l'un de l'autre pour que l'on puisse négliger leurs interactions mutuelles. Donner l'expression du hamiltonien \hat{H}_0 de S .
3. On considère maintenant que les deux atomes interagissent entre eux. Le hamiltonien \hat{H} de S est maintenant $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, où \hat{V} s'écrit de la façon suivante :

$$\hat{V} = V \left(\hat{D}_A^\dagger \hat{D}_B + \hat{D}_A \hat{D}_B^\dagger \right),$$

avec $\hat{D}_A = |g\rangle_A \langle e| \otimes \mathbb{1}_B$ et $\hat{D}_B = \mathbb{1}_A \otimes |g\rangle_B \langle e|$, où on a noté $\mathbb{1}_i$ l'opérateur identité dans $\mathcal{H}^{(i)}$, ($i = A, B$) et $V \in \mathbb{R}$.

L'opérateur \hat{V} est une modélisation simplifiée de l'interaction dipolaire entre les deux atomes.

- (a) Écrire la matrice représentant \hat{H} dans la base orthonormée de \mathcal{H} déterminée à la question 1.
- (b) En déduire les niveaux d'énergie de S et les vecteurs propres associés.
4. Sans passer par l'écriture matricielle de \hat{H} , on aurait pu raisonner de la façon suivante. Soit \hat{N} , l'opérateur défini par l'expression suivante :

$$\hat{N} = \hat{D}_A^\dagger \hat{D}_A + \hat{D}_B^\dagger \hat{D}_B.$$

- (a) Donner les valeurs propres et une base orthonormée de vecteurs propres de \hat{N} .
- (b) Proposer une signification physique pour \hat{N} ?
- (c) Montrer que $[\hat{H}, \hat{N}] = 0$. Quelle est la signification de cette relation ?
- (d) Retrouver ainsi qu'il suffit de diagonaliser une matrice 2×2 pour obtenir les énergies et les états correspondants de S .
5. Parmi les états propres de \hat{H} , identifier les états qui sont séparables et les états qui sont intriqués.

– TD n°5 –

Puits de potentiel, courant de probabilité et effet tunnel

5.1 Puits de potentiel fini, carré - États liés

On considère une particule de masse m dont l'énergie potentielle $V(x)$ a la forme d'un puits carré (cf. figure 5.1), c'est-à-dire définie par

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{pour } |x| < \frac{a}{2} \\ 0 & \text{pour } |x| \geq \frac{a}{2} \end{cases} .$$

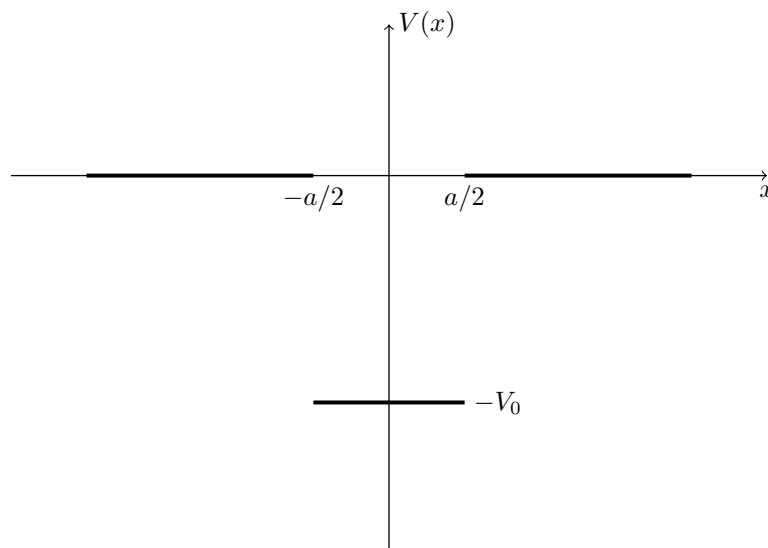


FIGURE 5.1 – Énergie potentielle $V(x)$ de la particule en fonction de x .

5.1.1 Mouvement classique

1. Rappeler ce que serait le mouvement de la particule en mécanique classique. On distinguera le cas où $E > 0$ et le cas où $-V_0 < E < 0$.

5.1.2 Calcul des états liés ($-V_0 < E < 0$)

2. Écrire l'équation de Schrödinger stationnaire et la résoudre dans chacune des trois zones. On posera

$$k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} , \quad K = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$$

où E est la valeur propre de H considérée.

3. On peut montrer que, dans le cas d'une discontinuité de potentiel finie, les fonctions d'onde restent bornées, continues et de dérivée continue. Écrire les relations qui en découlent en $x = a/2$ et montrer que

$$\begin{aligned} k &= K \tan(Ka/2) && \text{(solutions paires)} \\ k &= -K \cot(Ka/2) && \text{(solutions impaires)} \end{aligned}$$

Montrer par une méthode graphique simple qu'il y a quantification des énergies.

Indice : on pourra tracer, en fonction de la variable K , les courbes d'équation $y = |\cos(Ka/2)|$ et $y = |\sin(Ka/2)|$, en prenant garde à la condition sur le signe de $\tan(Ka/2)$.

4. Montrer qu'il existe toujours au moins un état lié. Que se passe-t-il lorsque le puits devient très profond ?

5.1.3 Puits infiniment profond

5. On considère maintenant un puits carré infiniment profond, $V_0 \rightarrow \infty$. Calculer les énergies des états liés dans ce cas. À quelle échelle d'énergie doit-on comparer V_0 pour pouvoir parler de puits très profond ?
6. Étudier les fonctions d'onde correspondant aux états liés d'un puits infiniment profond. Montrer que pour $V_0 \rightarrow \infty$ la fonction d'onde est continue, que sa dérivée est discontinue et que la fonction d'onde s'annule à l'extérieur du piège.
7. Étudier le cas où V_0 tend vers l'infini et a tend vers zéro avec $V_0 a$ constant.

5.2 Puits de potentiel fini, carré - États libres ($E > 0$)

Pour un puits carré comme en 5.1, on étudie le cas stationnaire $E > 0$ (états *libres*).

8. Résoudre l'équation de Schrödinger dans chacune des trois zones et écrire les relations de raccordement.
9. Montrer que pour toute énergie E , les solutions forment un espace vectoriel de dimension 2. Montrer que toute solution peut se décomposer en deux ondes planes qui se propagent en sens contraire. Peut-on normaliser ces solutions ?

5.3 Courant de probabilité

Soit $\psi(\vec{r}, t)$ la fonction d'onde d'une particule de masse m placée dans un potentiel $V(\vec{r})$. On définit la densité de probabilité de présence de la particule au point \vec{r} et à l'instant t par

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) . \quad (5.1)$$

10. Montrer que cette densité satisfait à une équation de *conservation* :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (5.2)$$

où le *courant de probabilité* \vec{J} est donné par :

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^* (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi \right] . \quad (5.3)$$

11. Donner \vec{J} pour une fonction d'onde de la forme

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{i f(\vec{r}, t)} . \quad (5.4)$$

12. Préciser \vec{J} dans le cas d'une onde plane, caractérisée par $f(\vec{r}, t) = \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t$.

5.4 Effet tunnel

On considère le problème unidimensionnel d'une marche de potentiel, définie comme suit :

$$V(x) = \begin{cases} U_0 & \text{pour } |x| < \frac{a}{2} \\ 0 & \text{pour } |x| \geq \frac{a}{2} \end{cases}.$$

On pose dans la suite $U_0 = \frac{\hbar^2}{2m} K^2 > 0$.

On dénote par 1, 2 et 3 les trois régions de l'espace : $] -\infty, -\frac{a}{2}]$, $[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}]$ et $[\frac{a}{2}, \infty[$ respectivement.

13. Représenter graphiquement le potentiel $V(x)$.
14. Écrire la fonction d'onde d'énergie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ comme une somme d'ondes se propageant vers les x croissants et vers les x décroissants, d'amplitudes respectives A_i^+ et A_i^- ($i = 1, 2, 3$). On posera dans la suite $q^2 = k^2 - K^2$.
15. Calculer les courants de probabilité dans les trois régions d'espace en fonction des A_i^\pm .
16. On étudie le cas où l'onde incidente vient de $-\infty$. Établir le système d'équations vérifié par les amplitudes A_i^\pm .
17. Calculer les coefficients de réflexion r et transmission t associés aux amplitudes de part et d'autre de la barrière.
18. Montrer que dans le cas général, les coefficients de transmission/réflexion en intensité définis par $T = |t|^2$ et $R = |r|^2$ vérifient $R + T = 1$. Vérifier cette égalité ici.
19. Calculer le coefficient de transmission en intensité T dans le cas où $E > U_0$ et le mettre sous la forme

$$T(\Phi) = \frac{1}{1 + A^2 \sin^2(\Phi)} \quad \text{avec } \Phi = qa,$$

avec A une fonction de k et q à déterminer. Montrer que $T(\Phi)$ possède des résonances. Donner leurs positions et largeurs. La fonction T est l'analogue de celle qui décrit la transmission d'un dispositif optique bien connu. Lequel ?

20. On suppose maintenant $0 < E < U_0$. Calculer explicitement $t(a)$ et $T(a)$. Quel est l'analogue optique de ce phénomène ?
21. On considère une double hétérojonction de semi-conducteurs GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs avec les paramètres suivants :

- masse effective de l'électron égale à $0,067 m_e$
- $U_0 \simeq 375$ meV pour $x = 0,3$
- largeur de la barrière entre 1 et 10 nm.

Quelle est la probabilité de passage pour un électron d'énergie cinétique $E = 40$ meV ?

– TD n°6 –

Commutation des observables et symétries

6.1 Commutation

Soit \hat{A} , \hat{B} et \hat{C} trois opérateurs respectivement associés aux observables \mathcal{A} , \mathcal{B} et \mathcal{C} , et agissant dans l'espace de Hilbert \mathcal{H} .

1. Démontrer les propriétés $[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]$ et $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$.
2. On sait déjà que si deux opérateurs \hat{A} et \hat{B} commutent, ils sont simultanément diagonalisables. Montrer également que si $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, les opérateurs \hat{A} et \hat{B} ne peuvent pas partager un ensemble complet de vecteurs propres communs (ECOC).
3. On considère les opérateurs position $\hat{X} = x$ et impulsion $\hat{P} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ dans la représentation des positions. Calculer le commutateur généralisé $[\hat{X}^n, \hat{P}]$.
4. Montrer que si $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, on a aussi $[e^{-i\hat{A}}, \hat{B}] = 0$. Quelles sont les conséquences pour l'observable \mathcal{B} , quand \hat{A} est le hamiltonien \hat{H} ?
5. (*facultatif*) La relation usuelle $e^{a+b} = e^a e^b$, valable pour les nombres complexes, est fautive en général pour des opérateurs \hat{A} et \hat{B} non-commutants. Montrer qu'au lieu de cela, ils vérifient l'identité suivante, dite *identité de Glauber* :

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]} \quad (6.1)$$

lorsqu'ils vérifient $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$. Cette identité n'est qu'un cas particulier de la formule générale de Baker, Campbell et Hausdorff, dite *formule BCH*.

6.2 Symétries et loi de conservation

6.2.1 Transformations

Définition : effectuer une transformation \mathcal{T} sur un système physique, c'est remplacer chacune de ses variables par une nouvelle variable, chacun de ses états par un nouvel état, tout en conservant les propriétés physiques du système.

On considère maintenant un système quantique dans un état $|\psi\rangle$ appartenant à un espace de Hilbert \mathcal{H} de dimension n . Soit \hat{A} l'opérateur associé à une observable \mathcal{A} du système.

6. À quelle condition $\{\hat{A}\}$ est-il un ensemble *complet* d'observables qui commutent (ECOC) ? On supposera cette condition vérifiée, et on notera $|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ les vecteurs propres de \hat{A} associés aux valeurs propres a_1, \dots, a_n , respectivement. On peut décrire chaque transformation \mathcal{T} du système physique à l'aide d'un opérateur \hat{T} agissant dans \mathcal{H} .
7. On note $|\psi'\rangle = \hat{T}|\psi\rangle$ l'action de la transformation \mathcal{T} sur les états du système. Donner l'expression de la probabilité p'_i d'observer le système décrit par $|\psi'\rangle$ dans l'état $|\varphi'_i\rangle$, et la confronter avec la probabilité p_i d'observer le système décrit par $|\psi\rangle$ dans l'état $|\varphi_i\rangle$.

8. Selon notre définition, \mathcal{T} conserve les propriétés physiques du système. Quelle condition sur \hat{T} peut-on en déduire ?
9. \mathcal{T} agit également sur les observables. En déduire l'expression de \hat{A}' en fonction de \hat{A} et \hat{T} ¹.
10. On dit que l'observable \mathcal{A} est *invariante* sous la transformation \mathcal{T} si $\hat{A}' = \hat{A}$. Montrer que dans ce cas $[\hat{A}, \hat{T}] = 0$.

6.2.2 Groupe de transformation

11. Considérons un groupe continu de transformations $\mathcal{T}(a)$ paramétrées par une variable réelle a , où $\mathcal{T}(0)$ est l'identité. Sous certaines conditions², on peut développer l'expression d'une transformation infinitésimale en

$$\hat{T}(\varepsilon) = \hat{\mathbb{1}} - i\varepsilon\hat{G} + \dots \quad (6.2)$$

où on négligera les termes d'ordre $o(\varepsilon)$.

Montrer que \hat{G} est hermitien : $\hat{G} = \hat{G}^\dagger$.

12. En utilisant le résultat de la question 9 ci-dessus, montrer que

$$\hat{A}' = \hat{A} - i\varepsilon[\hat{G}, \hat{A}] + \dots$$

13. L'opérateur $\hat{g} = -i\hat{G}$ est appelé le *générateur* du groupe des transformations $\mathcal{T}(a)$. Montrer que

$$\hat{g} = \hat{T}'(0),$$

où on a défini la dérivée de $\hat{T}(a)$ par rapport au paramètre a par

$$\hat{T}'(a) = \left. \frac{d}{dx} \hat{T}(x) \right|_{x=a}.$$

14. Montrer que

$$\hat{g} = \hat{T}(a)^{-1} \hat{T}'(a) = \hat{T}'(a) \hat{T}(a)^{-1}.$$

15. Et que finalement :

$$\hat{T}(a) = e^{-ia\hat{G}}.$$

6.2.3 Exemple : groupe des translations

Considérons à présent la translation infinitésimale d'une quantité a le long de l'axe x . L'opérateur correspondant est noté $\hat{T}(a)$. Soit $|x\rangle$ un vecteur propre de l'opérateur position \hat{X} (c'est-à-dire $\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$). On a par définition : $|x'\rangle = \hat{T}(a)|x\rangle \equiv |x+a\rangle$.

16. Montrer que $\hat{T}^{-1}(a) = \hat{T}^\dagger(a) = \hat{T}(-a)$.
17. Vérifier que $\hat{X}' = \hat{X} - a\hat{\mathbb{1}}$, en comparant l'action de \hat{X}' et de \hat{X} sur $|x\rangle$.
18. On note \hat{G} l'opérateur hermitien associé à \hat{T} (eq. 6.2). En appliquant le résultat de la question 12, en déduire que $\hat{G} = \hat{P}/\hbar$ où \hat{P} est l'opérateur impulsion.
19. Montrer que pour un système constitué d'une particule libre, le hamiltonien est invariant par translation. Dans ce cas, vérifier que $\forall a$:

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | T(a) | \psi(t) \rangle = 0. \quad (6.3)$$

20. En déduire que l'impulsion est une constante du mouvement.

1. Suggestion : comme \mathcal{T} conserve les propriétés physiques, elle doit conserver la valeur moyenne des observables.

2. $\mathcal{T}(a)$ est un groupe de transformation si $\mathcal{T}(a)\mathcal{T}(b) = \mathcal{T}(a+b)$ et $\mathcal{T}^{-1}(a) = \mathcal{T}(-a)$. On peut aussi introduire une topologie sur les éléments $\hat{T}(a)$ qui permet d'introduire la notion de limite $\lim_{a \rightarrow b} \mathcal{T}(a)$ et donc la notion de continuité de $\mathcal{T}(a)$ par rapport au paramètre a . On peut ensuite définir la dérivée $\left. \frac{d}{dx} \mathcal{T}(x) \right|_{x=a} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathcal{T}(a+h) - \mathcal{T}(a)}{h}$.

– TD n°7 –

Oscillateurs harmoniques quantiques

Rappels de mécanique classique

L'oscillateur harmonique le plus simple est une bille de masse m au bout d'un ressort de raideur k . Si la masse est déplacée de sa position d'équilibre en $q = 0$, le ressort exerce une force de rappel $F = -kq$. L'énergie potentielle associée au ressort est donc $U(q) = kq^2/2$, ce qui correspond au hamiltonien

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kq^2}{2}.$$

Une fois laissée seule, la bille adopte un mouvement décrit par les équations

$$\frac{dq}{dt} = \frac{p}{m} \quad \text{et} \quad \frac{dp}{dt} = -kq$$

qui donnent naissance à une oscillation de fréquence $\omega = \sqrt{k/m}$:

$$q(t) = q(0) \cos(\omega t) + \frac{1}{m\omega} p(0) \sin(\omega t),$$

$$p(t) = p(0) \cos(\omega t) - m\omega q(0) \sin(\omega t).$$

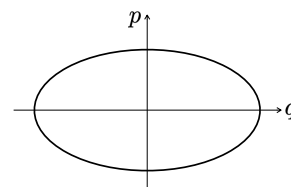


FIGURE 7.1 – Mouvement d'un oscillateur harmonique classique dans l'espace des phases (q, p) .

Le mouvement classique de l'oscillateur peut alors être représenté comme une trajectoire dans l'espace des phase, c'est-à-dire une courbe paramétrique de l'impulsion p en fonction de la position q (cf. figure 7.1).

En réalité, l'oscillateur harmonique est un système physique dont l'importance va bien au-delà des systèmes mécaniques oscillants. En effet, quasiment tout mouvement d'oscillation est régi par un hamiltonien dont la forme est analogue à celle d'un oscillateur harmonique mécanique, et a par conséquent la même description quantique. Quelques exemples : le champ électromagnétique, les vibrations d'un réseau cristallin, les circuits résonnants inductif-capacitif utilisés en qnantronique, et les quasi-particules en physique de la matière condensée.

7.1 Quantification « à la Dirac »

On considère un oscillateur harmonique à une dimension, de masse m et de fréquence ω , décrit par la position q et l'impulsion p . Le hamiltonien qui décrit cet oscillateur est :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2. \quad (7.1)$$

On introduit les variables réduites (sans dimension) :

$$Q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q \quad \text{et} \quad P = \frac{1}{\sqrt{m\omega}} p \quad (7.2)$$

de sorte que le hamiltonien s'écrit ¹

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(Q^2 + P^2). \quad (7.3)$$

Pour quantifier cet oscillateur, la méthode de Dirac consiste à remplacer les variables classiques q et p par deux opérateurs \hat{q} et \hat{p} en imposant la relation de commutation $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ qui conduit à $[\hat{Q}, \hat{P}] = i$. Une façon de trouver les valeurs propres et états propres du hamiltonien quantique \hat{H} est d'introduire l'opérateur \hat{a} défini par

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + i\hat{P}). \quad (7.4)$$

Comme les opérateurs \hat{q} et \hat{p} , sont hermitiens, il en est évidemment de même pour \hat{Q} et \hat{P} . On en déduit donc :

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + i\hat{P})^\dagger \quad \text{soit} \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - i\hat{P}) \quad (7.5)$$

de sorte que les opérateurs \hat{a} et \hat{a}^\dagger ne sont pas hermitiens. Exprimons maintenant \hat{Q} et \hat{P} en fonction de \hat{a} et \hat{a}^\dagger :

$$\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad \text{et} \quad \hat{P} = \frac{1}{i\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \quad (7.6)$$

1. Montrer que $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$.
2. En déduire l'expression du hamiltonien \hat{H} en fonction de \hat{a} et \hat{a}^\dagger :

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (7.7)$$

3. La diagonalisation du hamiltonien \hat{H} est par conséquent équivalente à la diagonalisation de l'opérateur $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ qui est appelé « opérateur nombre ». Cet opérateur est évidemment hermitien, $\hat{N}^\dagger = \hat{N}$. Démontrer les relations de commutations suivantes ² :

$$[\hat{a}, \hat{N}] = \hat{a} \quad \text{et} \quad [\hat{a}^\dagger, \hat{N}] = -\hat{a}^\dagger. \quad (7.8)$$

7.2 États de Fock

Notons $|n\rangle$ les vecteurs propres normalisés de \hat{N} , associés à la valeur propre n :

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle. \quad (7.9)$$

4. Utiliser les relations de commutation (7.8) pour démontrer que :

$$\hat{N}\hat{a}|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle \quad (7.10a)$$

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle = (n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle. \quad (7.10b)$$

et en déduire que $\hat{a}|n\rangle$ et $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ sont vecteurs propres de \hat{N} pour les valeurs propres respectives $n-1$ et $n+1$.

On sait que les états propres de \hat{H} et donc de \hat{N} sont non dégénérés ³, c'est-à-dire que pour chaque valeur de n il existe au plus un état propre $|n\rangle$. Nous pouvons conclure de la question précédente que les états $\hat{a}|n\rangle$ et $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ sont respectivement proportionnels aux états $|n-1\rangle$ et $|n+1\rangle$. Nous indiquons « proportionnels » et pas « égaux » puisque les états $\hat{a}|n\rangle$ et $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ ne sont pas garantis d'être normalisés, alors que les états $|n-1\rangle$ et $|n+1\rangle$ sont normalisés d'après leur définition. Nous allons utiliser la condition de normalisation pour déterminer le coefficient de proportionnalité.

1. Avec ce changement de variable, le mouvement de l'oscillateur harmonique classique est décrit par les équations

$$\begin{aligned} Q(t) &= Q(0) \cos(\omega t) + P(0) \sin(\omega t), \\ P(t) &= P(0) \cos(\omega t) - Q(0) \sin(\omega t), \end{aligned}$$

de sorte que la trajectoire dans l'espace des phases (Q, P) est circulaire.

2. On rappelle que

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C].$$

3. Il s'agit d'une propriété générale des états liés pour un puits de potentiel à une dimension.

5. En utilisant le fait que les états propres du hamiltonien sont nécessairement normalisés à 1, montrer qu'à un facteur de phase arbitraire près, on a⁴ :

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (7.11a)$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (7.11b)$$

Ce résultat est à l'origine des noms d'opérateurs « création » et « annihilation »⁵ donnés respectivement à \hat{a}^\dagger et \hat{a} , comme représenté sur la figure 7.2.

Les équations (7.11) correspondent à une forme de récurrence entre les états $|n\rangle$. Elles indiquent que si l'état $|n\rangle$ d'énergie

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

existe comme un état physique (c'est-à-dire un état normalisé de l'espace de Hilbert), alors il en est de même pour l'état $|n-1\rangle$ d'énergie

$$E_{n-1} = \hbar\omega(n - 1/2).$$

De même, l'état $|n-2\rangle$, puis l'état $|n-3\rangle$, etc. doivent aussi exister. En continuant cette chaîne un nombre de pas suffisamment grand, nous aboutirons nécessairement à un état propre dont l'énergie serait négative. Seulement une valeur négative de l'énergie est interdite. Comment pouvons-nous alors résoudre cette contradiction ?

La seule possibilité est de supposer que n soit un entier positif. L'action successive de l'opérateur annihilation \hat{a} sera ainsi interrompue une fois que nous serons parvenus à $n = 0$. À ce stade :

$$\hat{a}|n=0\rangle = 0. \quad (7.12)$$

Si on suppose que l'état $|n=0\rangle$ – que nous écrirons plus simplement $|0\rangle$ – existe bel et bien, alors il existe une infinité d'états $|n\rangle$ associés aux entiers n positifs. Ces états propres du hamiltonien d'un oscillateur harmonique sont appelés *états de Fock* ou *états nombre*. L'état $|0\rangle$ est appelé le vide⁵.

6. Démontrer que l'état $|n\rangle$ se déduit du vide $|0\rangle$ par les actions successives de l'opérateur création \hat{a}^\dagger , avec la relation :

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle. \quad (7.13)$$

La construction des opérateurs \hat{a} , \hat{a}^\dagger et \hat{N} a donc été fructueuse. Par une méthode purement algébrique, nous avons trouvé le spectre des niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique. Une spécificité est que les niveaux d'énergie quantifiés $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ sont équidistants. La séparation $\hbar\omega$ entre deux niveaux successifs est appelée un *quantum* d'énergie. Un quantum peut être associé à une excitation élémentaire : ce sera un photon pour le champ électromagnétique quantifié, un phonon pour les modes de vibration d'un solide.

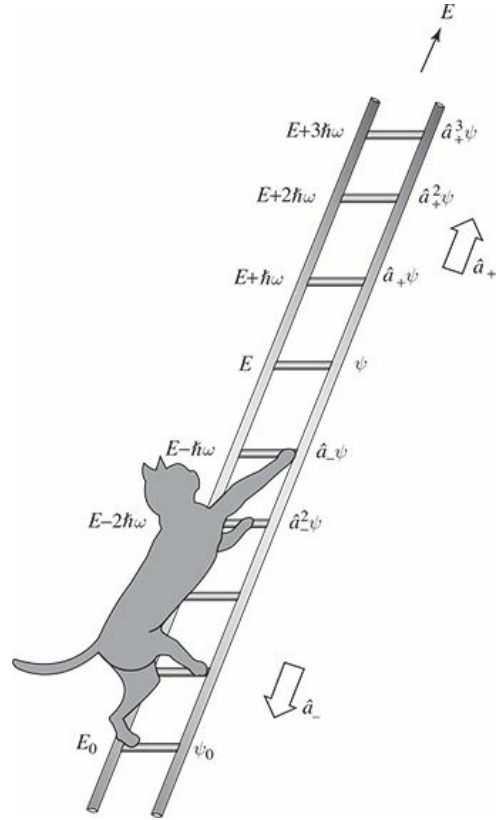


FIGURE 7.2 – Échelle des états $|n\rangle$ de l'oscillateur harmonique. Tiré de Griffiths & Schroeter.

4. On pourra utiliser la relation $\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n$.

5. Il est important de bien faire la différence entre le vecteur $|0\rangle$ qui représente le vide, et 0, le vecteur nul qui appartient aussi à l'espace de Hilbert des états mais qui est sans réalité physique. Ainsi, pour tout vecteur $|\psi\rangle$, $|\psi\rangle + 0 = |\psi\rangle$. Par contre l'état vide $|0\rangle$ a bien une réalité physique : $|\psi\rangle + |0\rangle \neq |\psi\rangle$. L'état vide est associé à des fluctuations dites de « point zéro » qui se manifestent en électrodynamique quantique, comme par exemple le *Lamb-shift* entre les niveaux *2s* et *2p* de l'atome d'hydrogène, ou l'effet Casimir avec l'existence d'une force attractive entre deux plaques parallèles conductrices et non chargées.

7. Pour un état de Fock arbitraire $|n\rangle$, calculer $\langle\hat{X}\rangle$, $\langle\hat{P}\rangle$, $\langle(\Delta\hat{X})^2\rangle$ et $\langle(\Delta\hat{P})^2\rangle$. Vérifier la relation de dispersion de Heisenberg entre la position Q et l'impulsion P .
8. On considère un état arbitraire initial $|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ qui évolue avec le hamiltonien de l'oscillateur harmonique.
 - (a) Exprimer l'état $|\psi(t)\rangle$ à un instant ultérieur t .
 - (b) Montrer que les valeurs moyennes des opérateurs \hat{a} et \hat{a}^\dagger s'écrivent

$$\langle\hat{a}\rangle(t) = \langle\hat{a}\rangle(0)e^{-i\omega t} \quad (7.14a)$$

$$\langle\hat{a}^\dagger\rangle(t) = \langle\hat{a}^\dagger\rangle(0)e^{i\omega t}. \quad (7.14b)$$

- (c) En déduire $\langle\hat{Q}\rangle$ et $\langle\hat{P}\rangle$. Justifier que l'on appelle *états stationnaires* les états de Fock.

Ainsi, les états de Fock sont des états non-classiques, incompatibles avec notre représentation du comportement classique d'un oscillateur harmonique. Par contre, dans tout autre état quantique que l'état de Fock, l'évolution au cours du temps des valeurs moyennes de la position et de l'impulsion reproduisent le mouvement classique de l'oscillateur harmonique.

7.3 Fonctions d'onde pour les premiers états de Fock

Pour déterminer les fonctions d'onde des états de Fock, nous allons voir que nous pouvons utiliser la puissance des algèbres d'opérateurs, sans avoir besoin de revenir à la résolution de l'équation de Schrödinger. Il y a cependant une complication : nous devons décrire l'oscillateur harmonique dans l'espace des états qui est maintenant un espace de Hilbert de dimension infinie. Les fonctions d'onde peuvent alors être déterminées soit dans la représentation en position Q où la base des vecteurs d'état $|Q\rangle$ est la collection de tous les pics de Dirac à chaque Q , soit dans la représentation en impulsion P où la base des vecteurs d'état $|P\rangle$ est la collection de toutes les ondes planes. On admet les relations qui permettent de convertir les fonctions d'onde ψ suivant le choix d'une représentation en Q ou en P :

$$\psi(Q) = \langle Q|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle P|\psi\rangle e^{iPQ} dP = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(P) e^{iPQ} dP \quad (7.15a)$$

$$\tilde{\psi}(P) = \langle P|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle Q|\psi\rangle e^{-iPQ} dQ = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(Q) e^{-iPQ} dQ \quad (7.15b)$$

9. On se place dans la représentation en position Q . On rappelle que l'opérateur \hat{Q} multiplie simplement la fonction d'onde par la variable de position :

$$\hat{Q}|\psi\rangle \rightarrow Q\psi(Q).$$

Montrer que l'action de l'opérateur \hat{P} sur une fonction d'onde $\psi(Q)$ est équivalente à l'opérateur $-i\frac{d}{dQ}$:

$$\hat{P}|\psi\rangle \rightarrow -i\frac{d}{dQ}\psi(Q).$$

10. En exprimant la relation $\hat{a}|0\rangle = 0$ dans la représentation Q , montrer que la fonction d'onde $\psi_0(Q) = \langle Q|0\rangle$ associée à l'état vide $|0\rangle$ s'écrit :

$$\psi_0(Q) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-Q^2/2}. \quad (7.16)$$

11. Déduire de l'équation (7.16) l'expression du vide $|0\rangle$ en représentation P :

$$\tilde{\psi}_0(P) = \langle P|0\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-P^2/2}. \quad (7.17)$$

12. En faisant agir l'opérateur création \hat{a}^\dagger sur l'état vide $|0\rangle$, déterminer l'expression $\psi_1(Q)$ de l'état de Fock pour $n = 1$ en représentation Q :

$$\psi_1(Q) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} Q e^{-Q^2/2}. \quad (7.18)$$

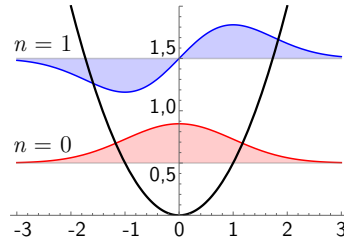


FIGURE 7.3 – A test figure with its caption side by side

Les fonctions d'onde $\psi_0(Q)$ et $\psi_1(Q)$ pour les deux premiers niveaux d'énergie sont représentées sur la figure 7.3. Nous avons retrouvé des résultats généraux : tout d'abord, la fonction d'onde de l'état fondamental n'a pas de zéro, ou nœud, et c'est même le seul état propre d'énergie qui n'ait pas de nœud. Par contre la fonction d'onde du premier état excité a un nœud en $Q = 0$.

En pratique

À ma connaissance, nous ne sommes pas encore capables de préparer ni de mesurer des états quantiques arbitraires d'un oscillateur mécanique, en particulier ceux pour les énergies les plus basses. Par contre ces états peuvent être préparés en optique quantique. Les grandeurs équivalentes à Q et P sont alors les amplitudes des quadratures du champ pour certaines phases. Des mesures sensibles à la phase du champ peuvent alors être réalisées au moyen d'une *détection homodyne* utilisant un *oscillateur local*. Nous verrons le principe de cette mesure dans un prochain cours.

La figure 7.4 représente le résultat d'un grand nombre de mesures homodynes effectuées sur la variable équivalente à Q , sur un état quantique d'un mode optique préparé expérimentalement. Les courbes du haut de la figure correspondent à la mesure effectuée

sur l'état vide $|0\rangle$ qui est tout simplement obtenu en bloquant le faisceau arrivant sur le détecteur. Les courbes du bas correspondent à une mesure effectuée sur un état à un photon $|1\rangle$. Cet état a été préparé par fluorescence paramétrique à deux photons dont nous verrons également le principe. Les histogrammes correspondent aux distributions de probabilité $|\psi_0(Q)|^2$ et $|\psi_1(Q)|^2$, conformément aux expressions (7.16) et (7.18). L'accord est quasiment parfait pour l'état vide $n = 0$. Par contre, dans le cas de l'état $n = 1$, les données expérimentales sont modélisées en combinant la probabilité de trouver un photon avec celle de trouver zéro photon. Ce résultat vient du fait qu'il est impossible de détecter un état contenant rigoureusement un photon, du fait des imperfections optiques comme les pertes dans la propagation ou la détection avec un rendement quantique inférieur à l'unité.

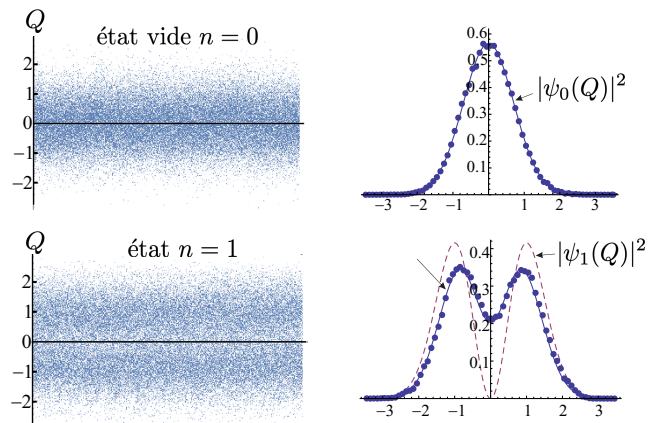


FIGURE 7.4 – Mesures des densités de probabilité selon la valeur de Q pour un état vide $n = 0$ et un état $n = 1$ du champ électromagnétique. Les courbes de gauche représentent les résultats de mesures successives de l'opérateur \hat{Q} , tandis que les courbes de droite représentent ces données sous la forme d'histogrammes. Dans le cas de l'état à un photon, la courbe expérimentale peut être ajustée par $0.62|\psi_1(Q)|^2 + 0.38|\psi_0(Q)|^2$. Ces données sont adaptées de l'article de A. I. Lvovsky et S. A. Babichev, *Synthesis and tomographic characterization of the displaced Fock state of light*, *Phys. Rev. A* **66**, 011801 (2002) – arXiv :quant-ph/0202163.

– TD n°8 –

Évolution des systèmes quantiques

On considère un système dont le hamiltonien s'écrit

$$H = H_0 + W(t)$$

où H_0 est un hamiltonien indépendant du temps, dont on connaît les valeurs propres E_i et les vecteurs propres $|\phi_i\rangle$, et $W(t)$ est une perturbation qui dépend du temps t . Les états $|\phi_i\rangle$ ne sont pas vecteurs propres de $H = H_0 + W(t)$ et par conséquent, si à l'instant t_0 le système est dans l'un des états propres $|\psi(0)\rangle = |\phi_i\rangle$, alors à un instant $t > t_0$ le système aura une probabilité non nulle de se trouver dans un des autres états propres $|\phi_j\rangle$, $j \neq i$.

Au premier ordre en $W(t)$ de la théorie des perturbations, la probabilité de transition de $|\phi_i\rangle$ à $|\phi_j\rangle$ est donnée par

$$\mathcal{P}_{\phi_i \rightarrow \phi_j} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t dt' e^{i(E_j - E_i)t'/\hbar} \langle \phi_j | W(t') | \phi_i \rangle \right|^2 \quad (8.1)$$

8.1 Couplage de deux spins

On considère deux particules ayant chacune un spin $1/2$. Lorsque les particules sont très éloignées l'une de l'autre, le hamiltonien \hat{H}_0 du système total ne dépend pas des spins \vec{S}_1 et \vec{S}_2 de chacune des particules. Lorsque les deux particules se rapprochent, elles interagissent et le hamiltonien du système devient

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}(t) \quad \text{avec} \quad \hat{W}(t) = a(t) \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2.$$

On suppose que $a(t)$ est une fonction réelle du temps t telle que $\lim_{|t| \rightarrow \infty} a(t) = 0$, et dont le support est essentiellement contenu dans un intervalle de largeur τ autour de $t = 0$. Lorsque $t \rightarrow -\infty$, l'état des deux particules est

$$|\psi_{\text{init}}\rangle = |\psi_{\text{orb}}\rangle \otimes |+\rangle_1 \otimes |-\rangle_2$$

où $|\pm\rangle_i$ sont les états propres communs à S_i^2 et S_{iz} , ce dernier ayant pour valeurs propres $\pm\hbar/2$, ($i = 1, 2$). Par ailleurs, $|\psi_{\text{orb}}\rangle$ appartient à l'espace de Hilbert dans lequel agit l'opérateur \hat{H}_0 .

1. Soit $|\psi(t)\rangle$ l'état du système à l'instant t . Écrire l'équation différentielle satisfaite par $|\psi(t)\rangle$.
2. Soit $|\psi_I(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle$. Montrer que $|\psi_I(t)\rangle$ vérifie une équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = H_I(t) |\psi_I(t)\rangle,$$

où on donnera l'expression de $H_I(t)$.

3. En remarquant que $[H_I(t), H_I(t')] = 0, \forall (t, t') \in \mathbb{R}^2$, en déduire l'expression intégrale de $|\psi_I(t)\rangle$, puis celle de $|\psi(t)\rangle$.
4. En déduire la probabilité $\mathcal{P}(+- \rightarrow -+)$ que les deux particules soient dans l'état $|\psi_{\text{fin}}\rangle = |-\rangle_1 \otimes |+\rangle_2$ lorsque $t \rightarrow +\infty$.

5. Calculer $\mathcal{P}(+- \rightarrow -+)$ en utilisant la théorie des perturbations dépendantes du temps au premier ordre. Discuter les conditions de validité d'une telle approximation en comparant les résultats obtenus à ceux de la question précédente.
6. On suppose maintenant que chaque spin interagit en plus avec un champ magnétique statique dirigé suivant l'axe Oz : $\vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_z$. Le hamiltonien du système devient

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_0 + \hat{W}(t) \quad \text{avec} \quad \hat{V}_0 = -B_0 (\gamma_1 S_{1z} + \gamma_2 S_{2z}).$$

Dit hamiltonien Zeeman, le terme \hat{V}_0 fait intervenir les rapports gyromagnétiques γ_1 et γ_2 de chacun des deux spins.

En prenant $a(t) = a_0 e^{-t^2/\tau^2}$, calculer $\mathcal{P}(+- \rightarrow -+)$ par la théorie des perturbations dépendantes du temps au premier ordre. Les paramètres a_0 et τ étant fixés, discuter des variations de $\mathcal{P}(+- \rightarrow -+)$ en fonction de B_0 .

8.2 Transition entre états d'un spectre discret

On considère une particule dont l'énergie potentielle est harmonique. Son hamiltonien sera celui d'un oscillateur harmonique à une dimension :

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2.$$

Rappelons qu'en posant $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$ et $p_0 = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}$, les opérateurs position et impulsion s'expriment en fonction des opérateurs création et annihilation :

$$\hat{x} = x_0 (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad (8.2a)$$

$$\hat{p} = -i p_0 (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad (8.2b)$$

Les opérateurs a et a^\dagger vérifiant les relations

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (8.3a)$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (8.3b)$$

7. Rappeler les valeurs propres $E_n^{(0)}$ de H_0 et leur dégénérescence.
8. La particule possède une charge q . Pour $t < 0$, la particule est dans l'état fondamental $|0\rangle$. Entre les instants $t = 0$ et $t = \tau$, elle est soumise à un champ électrique $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E} \vec{u}_x$, où \mathcal{E} est une constante. Donner l'expression du terme de perturbation $W(t)$ correspondant.
9. A l'ordre le plus bas en \mathcal{E} , calculer la probabilité $\mathcal{P}_{0 \rightarrow n}$ d'observer la particule dans un état $|n\rangle$ à l'issue de la période d'excitation, soit à $t = \tau$.
10. Montrer que pour $t \in [0, \tau]$, les états propres $|\Phi_n\rangle$ de $H = H_0 + W(t)$ sont définis par

$$|\Phi_n\rangle = e^{-i \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} \frac{\hat{p}}{\hbar}} |n\rangle$$

et donner leurs énergies E_n .

11. Montrer que l'expression exacte de $\mathcal{P}_{0 \rightarrow n}$ est

$$\mathcal{P}_{0 \rightarrow n} = \left| \sum_k \langle n | \Phi_k \rangle \langle \Phi_k | 0 \rangle e^{-i E_k \tau / \hbar} \right|^2.$$

12. Donner l'expression des états $|\Phi_k\rangle$ au premier ordre en \mathcal{E} .
13. Calculer $\mathcal{P}_{0 \rightarrow n}$ à l'ordre 2 en \mathcal{E} et comparer le résultat avec celui qu'on avait obtenu à la question 9.

8.3 Mesure du rapport gyromagnétique du neutron

On considère un faisceau de neutrons qui se déplacent selon un mouvement rectiligne uniforme dans une zone où règne un champ magnétique \vec{B} . Afin de décrire la dynamique du système, on munit l'espace de la base cartésienne $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$ et on suppose que

- (i) Les neutrons se propagent selon la direction \vec{e}_x avec la vitesse $\vec{v} = v\vec{e}_x$,
- (ii) Le champ magnétique est de la forme $\vec{B} = B_0\vec{e}_z + \vec{B}_1$ où \vec{B}_1 est un champ oscillant non-uniforme défini par

$$\vec{B}_1 = B_1 e^{-|x|/a} [\cos(\omega t)\vec{e}_x + \sin(\omega t)\vec{e}_y] . \quad (8.4)$$

Les grandeurs B_0 , B_1 , a et ω sont des constantes positives et on suppose que $B_1 \ll B_0$.

Les neutrons sont des particules de spin 1/2. Ils sont donc décrits par un état de spin dans un espace de Hilbert \mathcal{E}_S de dimension 2. Cet espace est muni de la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ des états propres de l'opérateur \hat{S}_z . On suppose que les neutrons sont tous initialement préparés dans l'état $|-\rangle$. À chaque neutron est associé un moment magnétique $\vec{\mathcal{M}}$ qui est un vecteur dont les composantes sont des opérateurs quantiques de la forme

$$\vec{\mathcal{M}} = \gamma \vec{S}, \quad \gamma = \frac{ge}{2M} \quad (8.5)$$

où e est la charge élémentaire, M la masse du neutron et g le rapport gyromagnétique du neutron. Pour éviter d'alourdir les notations, nous n'avons pas mis de « chapeau » ni sur $\vec{\mathcal{M}}$ ni sur \vec{S} mais il faut comprendre que leurs composantes sont bien des opérateurs qui agissent dans l'espace \mathcal{E}_S .

14. Sachant qu'on considère uniquement l'interaction entre le spin du neutron et le champ magnétique, donner l'expression du hamiltonien \hat{H} qui caractérise l'évolution de l'état de spin de chaque neutron en fonction de \vec{B} et de $\vec{\mathcal{M}}$.
15. Exprimer \hat{H} comme une matrice de dimension 2 dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ en fonction du temps t , des paramètres \hbar , a , v , ω , et des pulsations

$$\omega_0 = -\gamma B_0, \quad \omega_1 = -\gamma B_1. \quad (8.6)$$

Montrer que cet Hamiltonien s'écrit sous la forme $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$ où $\hat{H}_1(t)$ dépend explicitement du temps et où \hat{H}_0 est donné par

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (8.7)$$

16. En appliquant la théorie des perturbations dépendantes du temps à l'ordre 1, exprimer la probabilité de transition $\mathcal{P}(- \rightarrow +)$ de l'état $|-\rangle$ vers l'état $|+\rangle$ du neutron en supposant que les instants initial et final sont respectivement $t_i = -\infty$ et $t_f = +\infty$.
Montrer alors qu'elle s'écrit sous la forme

$$\mathcal{P}(- \rightarrow +) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle + | \hat{H}_1(t) | - \rangle \right|^2. \quad (8.8)$$

17. En utilisant le résultat de l'intégrale suivante (pour $\Omega \in \mathbb{R}$ et $\alpha > 0$)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\Omega t} e^{-\alpha|t|} = \frac{2\alpha}{\alpha^2 + \Omega^2}, \quad (8.9)$$

calculer explicitement $\mathcal{P}(- \rightarrow +)$.

18. Tracer schématiquement $\mathcal{P}(- \rightarrow +)$ en fonction de l'écart $(\omega_0 - \omega)$ et montrer que cette probabilité de transition a un comportement résonant. Quel est l'ordre de grandeur de la largeur de résonance en fonction des paramètres v et de a ? Interpréter ce résultat.

19. Imaginer et décrire un dispositif expérimental qui permettrait de mesurer physiquement l'amplitude de transition $\mathcal{P}(- \rightarrow +)$.
20. On ajoute un second champ magnétique oscillant au précédent de la forme

$$\vec{B}'_1 = B_1 e^{-|x-b|/a} [\cos(\omega t) \vec{e}_x + \sin(\omega t) \vec{e}_y] , \quad (8.10)$$

où $b \gg a$. Ce champ magnétique est par conséquent identique au champ \vec{B}_1 mais est décalé d'une distance b dans la direction des x croissant selon laquelle les neutrons se propagent. Reprendre le calcul précédent et déterminer la nouvelle expression de l'amplitude de transition $\mathcal{P}'(- \rightarrow +)$, que l'on écrira sous la forme

$$\mathcal{P}'(- \rightarrow +) = \mathcal{P}(- \rightarrow +) F(\omega_0 - \omega) \quad (8.11)$$

où F est une fonction du désaccord $(\omega_0 - \omega)$, qui dépend des paramètres b et v .

21. Tracer schématiquement $\mathcal{P}'(- \rightarrow +)$ comme une fonction de $(\omega_0 - \omega)$. Expliquer que le fait d'utiliser les deux champs magnétiques permet d'augmenter nettement la précision sur la mesure de ω_0 . Estimer alors la précision $\Delta\omega_0$ sur la mesure de ω_0 en fonction de v et de b .
22. La vitesse du faisceau de neutrons est estimée à $v = 100 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Quel doit être l'ordre de grandeur de b pour mesurer le moment gyromagnétique g avec une précision de l'ordre de $\Delta g = 10^{-6}$ en utilisant un champ magnétique dont l'amplitude B_0 est de l'ordre du tesla ?
Indice : on commencera par exprimer Δg en fonction de $\Delta\omega_0$.

– TD n°9 –

Inégalité de Leggett-Garg

9.1 Le chat de Schrödinger

L'état *chat de Schrödinger* correspond à la superposition cohérente entre deux états macroscopiquement différents d'un même système. Nous allons essayer de voir ici pourquoi de telles superpositions sont très sensibles à un couplage, même très faible, avec l'environnement.

9.1.1 L'oscillateur harmonique

On considère un oscillateur harmonique décrit par ses variables \hat{x} et \hat{p} . On introduit les observables réduites $\hat{X} = \hat{x}\sqrt{m\omega/\hbar}$ et $\hat{P} = \hat{p}/\sqrt{m\omega\hbar}$, ainsi que les opérateurs annihilation et création, respectivement définis par

$$\hat{a} = (\hat{X} + i\hat{P})/\sqrt{2} \quad \text{et} \quad \hat{a}^\dagger = (\hat{X} - i\hat{P})/\sqrt{2}.$$

1. Montrer que $\hat{P} = -i\frac{\partial}{\partial \hat{X}}$. On admettra que de façon symétrique, $\hat{X} = i\frac{\partial}{\partial \hat{P}}$.
2. Rappeler l'expression du hamiltonien en fonction des opérateurs \hat{a} et \hat{a}^\dagger ainsi que l'action de ces opérateurs sur les états propres $|n\rangle$ du hamiltonien.
3. En utilisant que $\hat{a}|0\rangle = 0$ retrouver, grâce aux opérateurs \hat{X} et \hat{P} , l'expression de la fonction d'onde de l'état fondamental $\psi_0(X)$ (que l'on ne cherchera pas à normaliser). Faire de même pour trouver sa transformée de Fourier.

9.1.2 Les états cohérents¹

Les états propres de l'opérateur \hat{a} – appelés états cohérents – sont les kets $|\alpha\rangle$ tels que

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad \text{et} \quad |\alpha\rangle = e^{-\alpha^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (9.1)$$

4. Calculer la valeur moyenne de l'énergie dans un état cohérent $|\alpha\rangle$. Calculer également les valeurs moyennes $\langle \hat{x} \rangle$ et $\langle \hat{p} \rangle$, les écart-types Δx et Δp , et montrer que $\Delta x \Delta p = \hbar/2$. Commenter.
5. En utilisant la même technique qu'à la question 3, déterminer la fonction d'onde $\psi_\alpha(X)$ de l'état quasi-classique $|\alpha\rangle$. Déterminer de même sa transformée de Fourier $\phi_\alpha(P)$.
6. On suppose qu'à l'instant initial $t = 0$, l'oscillateur est dans l'état quasi-classique $|\alpha_0\rangle$ avec $\alpha_0 = |\alpha_0|e^{i\phi}$.
 - (a) Montrer qu'à tout instant ultérieur t l'oscillateur est dans un état quasi-classique que l'on peut écrire $e^{-i\omega t/2}|\alpha(t)\rangle$ où l'on déterminera $\alpha(t)$.
 - (b) Évaluer $\langle \hat{x}(t) \rangle$ et $\langle \hat{p}(t) \rangle$. Justifier l'appellation d'état quasi-classique et dans quelle limite elle est valable.

1. Aussi appelés états *quasi-classiques*.

9.1.3 Fabrication d'un état *chat de Schrödinger*

Pendant l'intervalle de temps $[0, T]$ on considère un effet non-linéaire dans le piège harmonique, que l'on modélise par le hamiltonien

$$\hat{W} = \hbar g (\hat{a}^\dagger \hat{a})^2.$$

7. On suppose que $g \gg \omega$ et que $\omega T \ll 1$. Justifier brièvement pourquoi on peut alors prendre uniquement \hat{W} comme hamiltonien du système pendant l'intervalle $[0, T]$. À l'instant initial $t = 0$ le système est dans un état quasi-classique $|\psi(t = 0)\rangle = |\alpha\rangle$.
8. Montrer que les états $|n\rangle$ sont états propres de \hat{W} . En déduire le développement sur la base $\{|n\rangle\}$ de l'état $|\psi(T)\rangle$ du système à l'instant T .
9. Donner une expression simplifiée de $|\psi(T)\rangle$ pour les cas particuliers $T = 2\pi/g$ et $T = \pi/g$.
10. On choisit maintenant $T = \pi/2g$. Montrer que l'on a

$$|\psi(T)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\pi/4} |\alpha\rangle + e^{i\pi/4} |-\alpha\rangle \right) \quad (9.2)$$

11. On suppose que α est imaginaire pur $\alpha = i|\alpha|$. Décrire qualitativement l'état (9.2).
12. Pourquoi, pour α grand, peut-on considérer que cet état est une réalisation concrète d'un état de type *chat de Schrödinger*?

9.1.4 Superposition quantique vs. mélange statistique

On étudie dans cette partie les propriétés de l'état (9.2) pour une situation macroscopique $|\alpha| \gg 1$. On choisit α imaginaire pur et on pose $p_0 = |\alpha| \sqrt{2m\hbar\omega}$.

13. On prépare un système dans l'état quantique (9.2). Écrire les lois de probabilité (non normalisées) pour la position et pour l'impulsion du système.
14. On fait une expérience où on prépare un nombre N de systèmes indépendants, tous dans l'état (9.2), et on fait une mesure de l'impulsion sur chacun de ces systèmes. Le détecteur a une résolution δp sur la mesure de p telle que $\sqrt{m\hbar\omega} \ll \delta p \ll p_0$. Pour $N \gg 1$, dessiner qualitativement la distribution (histogramme) des résultats regroupant les N mesures.
15. L'état (9.2) se présente comme la superposition quantique de deux états macroscopiquement différents et conduit donc à certaines situations paradoxales lors du transfert des concepts quantiques au monde macroscopique. Plutôt que N systèmes dans l'état (9.2), un observateur extérieur pourrait prétendre que, durant notre expérience, nous disposons d'un mélange statistique tel que la moitié des systèmes sont dans l'état $|\alpha\rangle$ et l'autre moitié dans l'état $|-\alpha\rangle$, il n'y aurait alors plus de paradoxe. Mais, en ce cas, observerait-on la distribution de la question précédente pour les N mesures de l'impulsion?
16. Pour en avoir le cœur net, on procède à une mesure de la position sur les N systèmes indépendants, tous dans l'état (9.2). Dessiner la forme de la distribution regroupant les résultats en supposant que la résolution δx du détecteur est telle que $\delta x \ll \frac{1}{|\alpha|} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.
17. Notre observateur extérieur retrouverait-il les mêmes résultats pour la mesure de position dans le cas du mélange statistique de la question 15?
18. Évaluer la résolution δx nécessaire pour différencier une superposition quantique d'un mélange statistique. On fera l'application numérique pour un pendule simple de longueur 1 mètre et de masse 1 gramme, lâché sans vitesse de la position initiale $x_0 = 1 \mu\text{ m}$ (on commencera par calculer $|\alpha|$ à partir des résultats de la question 6).

9.1.5 Fragilité d'une superposition quantique

En pratique, de telles superpositions macroscopiques sont couplées à l'environnement, et ce couplage induit une décohérence depuis une superposition cohérente vers un mélange statistique. Nous allons ici étudier le temps caractéristique associé à cette décohérence. Considérons que l'oscillateur est initialement dans l'état quasi-classique $|\alpha_0\rangle$ et l'environnement dans l'état $|\chi_e(0)\rangle$, la fonction d'onde du système total est le produit des fonctions d'onde individuelles, et le vecteur d'état initial s'écrit comme le produit des vecteurs d'états des deux sous-systèmes :

$$|\Phi(0)\rangle = |\alpha_0\rangle \otimes |\chi_e(0)\rangle.$$

Le couplage est responsable de l'amortissement de l'oscillateur. À un instant t ultérieur, le vecteur d'état du système total devient

$$|\Phi(t)\rangle = |\alpha_1\rangle \otimes |\chi_e(t)\rangle$$

avec $\alpha_1 = \alpha(t)e^{-\gamma t}$ où $\alpha(t)$ correspond à l'état quasi-classique que l'on trouverait en l'absence d'amortissement (question 6a) et est un nombre réel positif.

19. Pour des états initiaux de type *chat de Schrödinger* pour l'oscillateur, le vecteur d'état du système total s'écrit à $t = 0$:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\pi/4} |\alpha_0\rangle + e^{i\pi/4} |-\alpha_0\rangle \right)$$

et à un instant t ultérieur :

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\pi/4} |\alpha_1\rangle \otimes |\chi_e^{(+)}(t)\rangle + e^{i\pi/4} |-\alpha_1\rangle \otimes |\chi_e^{(-)}(t)\rangle \right)$$

où $|\chi_e^{(+)}(t)\rangle$ et $|\chi_e^{(-)}(t)\rangle$ sont deux états normés *a priori* différents, non orthogonaux, de l'environnement. On choisit t tel que α_1 est imaginaire pur, avec $|\alpha_1| \gg 1$.

- Justifier brièvement l'expression précédente.
- On décompose les fonctions d'onde de l'environnement sur une base dénombrable, de telle sorte que $|\chi_e^{(\pm)}(t)\rangle = \sum_n c_n^{\pm} |\chi_n\rangle$. Donner la probabilité $P(x, n)$ de trouver la particule à la position x et l'environnement dans l'état $|\chi_n\rangle$. En déduire que la loi de probabilité de la mesure de position s'écrit

$$P(x) = \frac{1}{2} \left(|\psi_{\alpha_1}(x)|^2 + |\psi_{-\alpha_1}(x)|^2 + 2 \operatorname{Re} \left[i \psi_{\alpha_1}^*(x) \psi_{-\alpha_1}(x) \langle \chi_e^{(+)}(t) | \chi_e^{(-)}(t) \rangle \right] \right)$$

- On pose $\eta = \langle \chi_e^{(+)}(t) | \chi_e^{(-)}(t) \rangle$, qu'on suppose réel et compris entre 0 et 1. En reprenant les résultats de la section précédente, décrire sans calcul le résultat de N mesures de position indépendantes. Faire de même pour N mesures d'impulsion indépendantes.
 - Qualitativement, à quelle condition sur η peut-on différencier une superposition quantique d'un mélange statistique ?
20. Dans un modèle très simplifié, l'environnement est constitué d'un deuxième oscillateur, de même masse et de même pulsation que le premier. On suppose que ce deuxième oscillateur est initialement dans son état fondamental $|\chi_e(0)\rangle = |0\rangle$. Pour un couplage quadratique des deux oscillateurs, on admettra que les états $|\chi_e^{(\pm)}(t)\rangle$ sont des états quasi-classiques :

$$|\chi_e^{(\pm)}(t)\rangle = |\pm\beta\rangle.$$

- Expliquer pourquoi, pour des temps courts $\gamma t \ll 1$, on peut prendre $|\beta|^2 = 2\gamma t |\alpha_0|^2$.
 - À partir de l'expression de l'état cohérent (9.1), montrer que $\eta = \langle \beta | -\beta \rangle = e^{-2|\beta|^2}$.
 - Déterminer la valeur typique du transfert d'énergie entre les deux oscillateurs au-dessus de laquelle la différence entre superposition quantique et mélange statistique devient inobservable.
21. On reprend le pendule simple de la question 18, et on suppose que la constante de temps d'amortissement de l'énergie est d'une année. Évaluer, à partir des questions précédentes, le temps pendant lequel un état *chat de Schrödinger* est observable. Conclure.

9.2 L'inégalité de Leggett-Garg

Deux hypothèses assez générales s'appliquent à tout système décrit par la physique classique :

- (H₁) Un système donné *est* toujours dans un état *ou* dans un autre.
- (H₂) Il est possible de mesurer dans quel état ce système se trouve sans perturber sa dynamique.

La description quantique de la réalité est en désaccord avec ces deux hypothèses ; mais il est intéressant de se demander s'il ne serait pas possible d'imaginer une théorie alternative à la mécanique quantique qui satisfasse malgré tout les hypothèses (H1) et (H2) puisqu'elles semblent assez naturelles, surtout lorsqu'on les applique à un système macroscopique ? LEGGETT et GARG ont proposé un protocole qui permet de tester expérimentalement la validité de ces hypothèses en toute généralité, comme le montre l'exercice suivant.

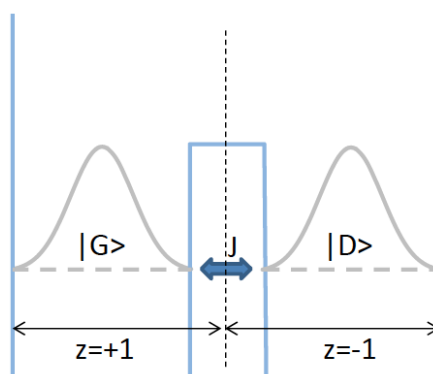
Système classique On considère d'abord un système S_{cl} qui est décrit par une variable $z(t)$ ne pouvant prendre que deux valeurs possibles ± 1 , et satisfaisant aux hypothèses « classiques » (H1) et (H2) (en quelque sorte un analogue classique d'un spin 1/2). On suppose que S_{cl} est préparé dans un état initial donné (non précisé) à un instant $t < 0$, puis qu'on le laisse évoluer sous l'effet de sa dynamique. On mesure alors son état à trois instants successifs $t_1 = 0$, $t_2 = \tau$ et $t_3 = 2\tau$, puis on calcule la quantité $A(\tau) = z(t_1)z(t_2) + z(t_2)z(t_3) - z(t_1)z(t_3)$.

22. Montrer que $A(\tau)$ est égal soit à $+1$, soit à -1 , soit à -3 . En répétant les mesures un grand nombre de fois sur des systèmes préparés et évoluant de manière identique, on peut calculer $f(\tau) = \langle A(\tau) \rangle$ où $\langle \rangle$ désigne la moyenne d'ensemble. Montrer que f doit nécessairement vérifier l'inégalité dite de Leggett-Garg :

$$-3 \leq f \leq 1 \quad (9.3)$$

23. On modifie maintenant légèrement le protocole expérimental : au lieu de mesurer l'état de S_{cl} dans chaque séquence à t_1 puis t_2 puis t_3 , on le mesure soit à t_1 puis t_2 , soit à t_2 puis t_3 , soit à t_1 puis t_3 . Montrer que si S_{cl} vérifie les hypothèses (H1) et (H2), l'inégalité de Leggett-Garg doit toujours être vérifiée.

Système quantique On considère maintenant un système S_q qui se comporte quantiquement, par exemple un électron passant par effet tunnel entre deux puits de potentiel, l'un à gauche (état $|G\rangle$) l'autre à droite (état $|D\rangle$). On note J le couplage tunnel entre les deux puits (voir schéma). L'expérience consiste à mesurer si l'électron est dans $|G\rangle$ (correspondant à $z = +1$) ou dans $|D\rangle$ (correspondant à $z = -1$).



24. On se place dans la base $\{|G\rangle, |D\rangle\}$. Écrire le hamiltonien du système en fonction des matrices de Pauli.
25. En supposant que le système est préparé dans $|G\rangle$ à un instant t_i , calculer la probabilité $P(t_i)$ de le trouver dans $|G\rangle$ à un instant ultérieur t_j . En déduire la valeur de $\langle z(t_j) \rangle$. Même question si le système est initialement préparé dans $|D\rangle$.

26. Maintenant on ne fait plus de supposition sur l'état du système à l'instant t_i , mais on mesure cet état successivement à t_i puis à t_j . Calculer la quantité $\langle z(t_i)z(t_j) \rangle$ en fonction de $t_j - t_i$.
27. On répète le même protocole expérimental que celui utilisé en question 23 sur le système classique S_{cl} , mais cette fois sur ce système quantique : on mesure l'état de S_q soit à t_1 puis t_2 , soit à t_1 puis t_3 , soit à t_2 puis t_3 , et on calcule la même fonction

$$f(\tau) = \langle z(t_1)z(t_2) + z(t_2)z(t_3) - z(t_1)z(t_3) \rangle.$$

Calculer $f(\tau)$ pour $\tau = \pi/(6J\hbar)$, et montrer que l'inégalité de Leggett-Garg est violée pour un système quantique. Cette violation a été observée dans plusieurs expériences récentes, mettant en jeu différents types de particules quantiques : photons², neutrinos³, impuretés porteuses de spins⁴, etc.

Conclure sur la validité des hypothèses (H1) et (H2) en mécanique quantique.

2. Xu, JS., Li, CF., Zou, XB. *et al.*, *Experimental violation of the Leggett-Garg inequality under decoherence*, Sci. Rep. **1**, 101 (2011).

3. J. A. Formaggio, D. I. Kaiser, M. M. Murskyj, and T. E. Weiss, *Violation of the Leggett-Garg Inequality in Neutrino Oscillations*, Phys. Rev. Lett. **117**, 050402 (2016).

4. Knee, G., Simmons, S., Gauger, E. *et al.*, *Violation of a Leggett-Garg inequality with ideal non-invasive measurements*, Nat. Commun. **3**, 606 (2012).