

# MECANIQUE QUANTIQUE

COURS 5 – SYSTEMES A DEUX NIVEAUX

QUENTIN GLORIEUX

3P001 – UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE 2015-2016

## SYSTEME A DEUX ETATS ET SUPERPOSITION

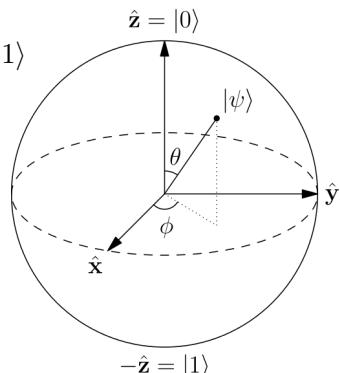
On a vu que l'on peut toujours décomposer un état quantique sur une base hilbertienne

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |\phi_n\rangle$$

En dimension deux, on a de façon générale :

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle$$

Pour décrire cet état, on utilise une représentation géométrique : la sphère de Bloch :



3

## PLAN

- Rappels
- L'inversion de la molécule d'ammoniac
- L'oscillation des neutrinos : Prix Nobel 2015
- La molécule d'ammoniac en présence d'un champ électrique

Systèmes à deux niveaux

2

## RAPPELS

- La valeur moyenne d'un opérateur  $\hat{A}$  pour l'état  $|\psi\rangle$  est donné par :

$$\langle a \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

- Evolution temporelle :

Soit  $|\psi(t)\rangle$  l'état d'un système à l'instant  $t$ . Tant que le système n'est soumis à aucune observation, son évolution au cours du temps est régie par l'équation de Schrödinger :

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

- $|\psi_n\rangle$  sont les états propres de l'Hamiltonien alors :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n |\psi_n\rangle e^{-iE_n t/\hbar}$$

Systèmes à deux niveaux

4

## SPHERE DE BLOCH

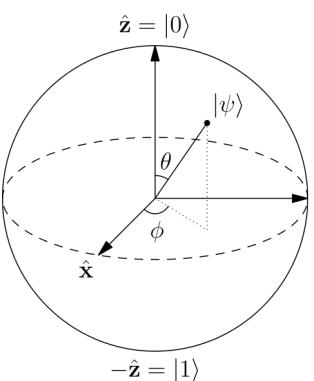
- Etat sur l'équateur :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

- Evolution :

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle e^{-iE_0 t/\hbar} + \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2}}|1\rangle e^{-iE_1 t/\hbar}$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_0 t/\hbar} \left( \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{e^{i(E_0-E_1)t/\hbar+\phi}}{\sqrt{2}}|1\rangle \right)$$

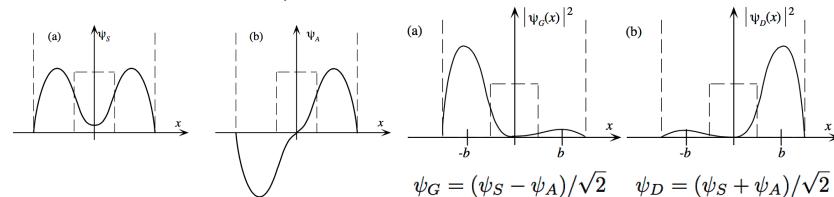


Systèmes à deux niveaux

5

## PHÉNOMÈNE D'INVERSION

On a trouvé les solutions symétriques et anti-symétriques (ce sont les états propres de l'énergie). On peut les combiner linéairement :



Cette combinaison linéaire va donc évoluer dans le temps !!!

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_S(x) e^{-iE_S t/\hbar} + \psi_A(x) e^{-iE_A t/\hbar}) \\ &= \frac{e^{-iE_S t/\hbar}}{\sqrt{2}} (\psi_S(x) + \psi_A(x) e^{-i\omega t}),\end{aligned}$$

avec  $\nu = (E_A - E_S)/\hbar = 2A \propto e^{-K\Delta}$ , la fréquence de Bohr du système.

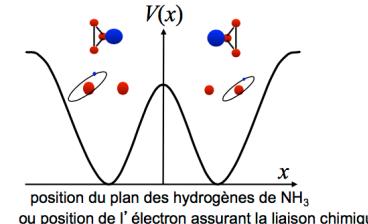
Cette valeur vaut  $\nu = 24$  GHz pour l'ammoniac. Très sensible à  $b$  et  $V_0$

Systèmes à deux niveaux

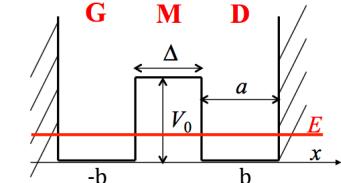
7

## MODELISATION DU DOUBLE PUITS

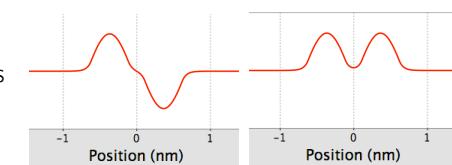
On s'intéresse aux niveaux d'énergie  $E < V_0$



position du plan des hydrogènes de NH<sub>3</sub>  
ou position de l'électron assurant la liaison chimique



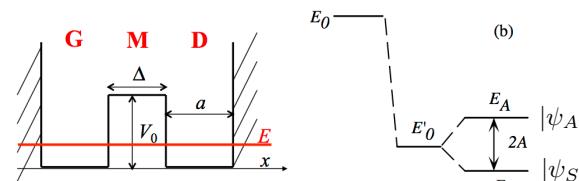
On cherche les solutions sous la forme ci-contre avec des solutions paires et des solutions impaires .



Systèmes à deux niveaux

6

## RESOLUTION EN NOTATION DE DIRAC



On ne s'intéresse qu'aux deux niveaux d'énergie les plus bas, ce sont des états propres de H, donc stationnaires  $|\psi_A\rangle$  et  $|\psi_S\rangle$ .

Un état quelconque s'écritra dans cette base :  $|\psi\rangle = \lambda|\psi_S\rangle + \mu|\psi_A\rangle$  ou sous forme matricielle  $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \end{pmatrix}$  avec  $|\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$

Que vaut le Hamiltonien dans cette base ?  $\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 - A & 0 \\ 0 & E_0 + A \end{pmatrix}$

C'est la restriction du Hamiltonien au sous-espace qui nous intéresse !

Systèmes à deux niveaux

8

## EVOLUTION TEMPORELLE

Comme d'habitude :  $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 - A & 0 \\ 0 & E_0 + A \end{pmatrix}$$

Puis  $|\psi(t)\rangle = \exp(-iE_0t/\hbar) \begin{pmatrix} \lambda \exp(i\omega_0t/2) \\ \mu \exp(-i\omega_0t/2) \end{pmatrix}$  avec  $2A = \hbar\omega_0$

Nous avions définis  $|\psi_D\rangle$  et  $|\psi_G\rangle$ , les états correspondant aux configurations classiques d'une particule à droite ou à gauche.

$$|\psi_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_S\rangle + |\psi_A\rangle) \quad |\psi_G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_S\rangle - |\psi_A\rangle)$$

Soit sous forme matricielle :  $|\psi_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |\psi_G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

Ce sont les vecteurs propres de :

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \hat{X}|\psi_D\rangle = |\psi_D\rangle ; \quad \hat{X}|\psi_G\rangle = -|\psi_G\rangle$$

Systèmes à deux niveaux

9

## COUPLAGE ET TRANSITION

On peut inverser le problème et se demander comment s'écrit le Hamiltonien, l'observable position et les états symétriques et anti-symétriques dans la base  $|\psi_D\rangle$  et  $|\psi_G\rangle$ ?

On a :  $|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

Dans cette base  $X$  est diagonal :  $\hat{X} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Et  $H$  s'écrit :  $\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$

Les termes diagonaux sont les énergies des états en absence de couplage (barrière haute et large).

Les termes anti-diagonaux sont des termes de couplage ! Ils caractérisent la transition entre les deux états à la fréquence  $A/\hbar$

Systèmes à deux niveaux

11

## OBSERVABLE POSITION

L'observable  $X$  est donc l'observable « position » :

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \hat{X}|\psi_D\rangle = |\psi_D\rangle ; \quad \hat{X}|\psi_G\rangle = -|\psi_G\rangle$$

On obtient la valeur +1 si la particule est à droite et -1 à gauche. Ce n'est pas l'observable position au sens des fonctions d'onde !

On peut calculer la valeur moyenne de la position dans l'état

$$|\psi(t)\rangle = \exp(-iE_0t/\hbar) \begin{pmatrix} \lambda \exp(i\omega_0t/2) \\ \mu \exp(-i\omega_0t/2) \end{pmatrix}$$

On trouve :  $\langle x \rangle = \lambda^* \mu e^{-i\omega_0 t} + \lambda \mu^* e^{i\omega_0 t}$

Si l'état initial est  $|\psi_D\rangle$  cela se simplifie en :  $\langle x \rangle = \cos \omega_0 t$

On a donc bien une oscillation comme nous avions vu précédemment.

Systèmes à deux niveaux

10

## REMARQUE SUR LA DIAGONALISATION

En dimension 2, sauf dans les cas très simples, il est souvent utile de se ramener à une matrice de la forme :

$$\begin{pmatrix} \cos(2\theta) & \sin(2\theta) \\ \sin(2\theta) & -\cos(2\theta) \end{pmatrix}$$

En effet on peut écrire le Hamiltonien :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 - A & -\eta \\ -\eta & E_0 + A \end{pmatrix} = E_0 \hat{I} - \sqrt{A^2 + \eta^2} \begin{pmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{pmatrix}$$

Il faut se souvenir des valeurs propres et vecteurs propres dans ce cas :

$$E_- = E_0 - \sqrt{A^2 + \eta^2} \quad |\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix},$$

$$E_+ = E_0 + \sqrt{A^2 + \eta^2} \quad |\psi_+\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}.$$

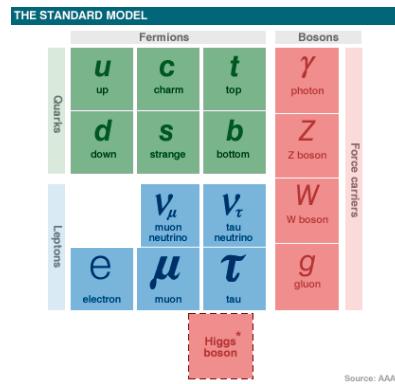
le vérifier !

Systèmes à deux niveaux

12

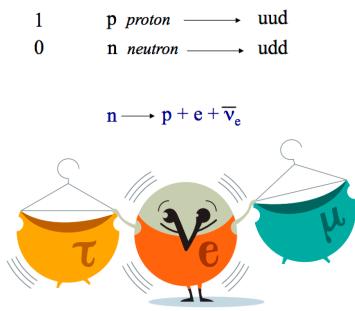
## PRIX NOBEL 2015 : OSCILLATIONS DES NEUTRINOS

- Takaaki Kajita and Arthur B. McDonald



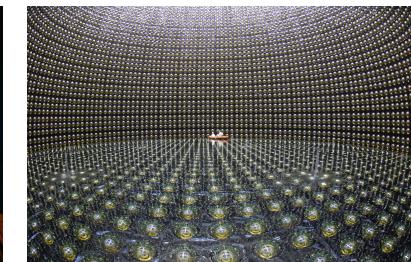
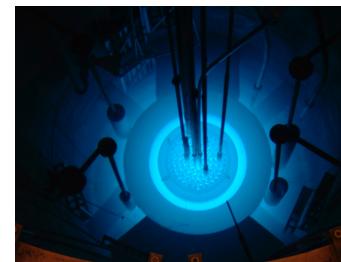
Pauli : "I have done a terrible thing, I have postulated a particle that cannot be detected".

13



## LES NEUTRINOS ATMOSPHERIQUES

- On vit dans un monde de neutrinos : 65 milliards de Neutrinos / seconde / cm<sup>2</sup> sur Terre
- Comment les détecter :
  - Grand réservoir d'eau très pure
  - Collision avec un noyau ou un électron pour créer des muons ou des électrons (selon la saveur du neutrino en question)
  - La particule chargée se propage dans l'eau : effet Cerenkov

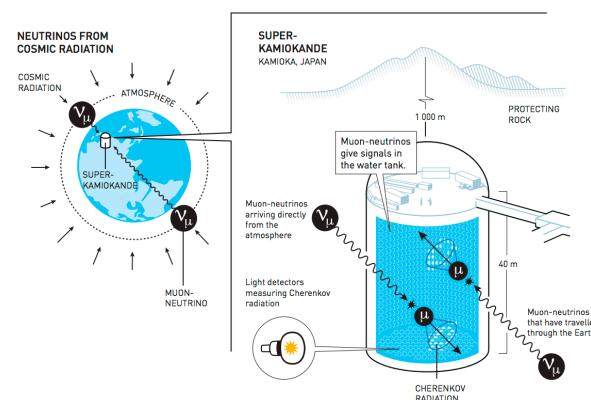


Systèmes à deux niveaux

14

## SUPER KAMIOKANDE - JAPON

Neutrinos atmosphériques :



Systèmes à deux niveaux

15

## LES NEUTRINOS SOLAIRES

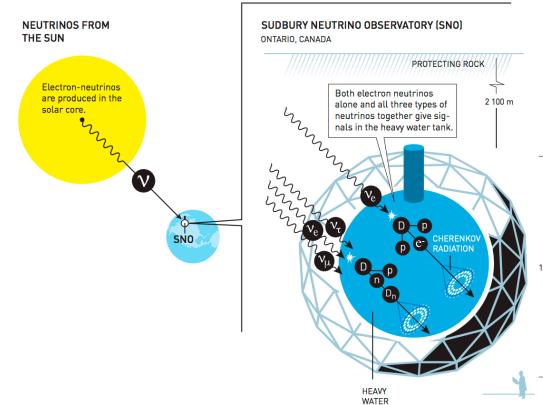
Le soleil produit des neutrinos électroniques  $2e^- + 4p \rightarrow {}^4_2\text{He} + 2\nu_e + 26.7 \text{ MeV}$   
Expérience SNO pour mesurer :

- les neutrinos électroniques

- tous les neutrinos

Manque-t-il des neutrinos ??

2/3 sont perdus dans le trajet depuis le soleil  
(environ 8 minutes à c)



Systèmes à deux niveaux

16

## OU SONT LES NEUTRINOS MANQUANTS ?

- Ils sont là : mais ils ont changés de saveur !
- Espace de Hilbert de dimension 3 :
  - Base saveur :  $|\nu_e\rangle$ ,  $|\nu_\mu\rangle$ ,  $|\nu_\tau\rangle$
  - Base énergie (masse) :  $|\nu_1\rangle$ ,  $|\nu_2\rangle$ ,  $|\nu_3\rangle$   
 $m_1 \neq m_2 \neq m_3$

(pour simplifier les calculs on se restreint à une base 2x2)

A l'instant d'émission les neutrinos solaires sont tous électroniques :

$$|\psi(t=0)\rangle = |\nu_e\rangle = \cos\theta|\mu_1\rangle + \sin\theta|\mu_2\rangle$$

Après propagation :  $|\psi(t)\rangle = e^{-iE_1 t/\hbar} \cos\theta|\mu_1\rangle + e^{-iE_2 t/\hbar} \sin\theta|\mu_2\rangle$

On peut alors calculer la probabilité de mesurer un neutrino électronique:

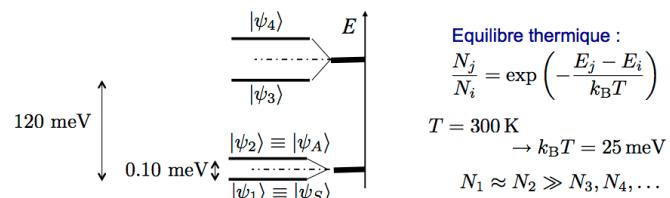
$$P_e(t) = |\langle\nu_e|\psi(t)\rangle|^2 = 1 - \sin^2 2\theta \sin^2((E_1 - E_2)t/\hbar)$$

Systèmes à deux niveaux

17

## DIPOLE DANS UN CHAMP ÉLECTRIQUE

Restriction à deux niveaux :



Dans la base  $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$  le Hamiltonien s'écrit :  $\hat{H}_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

La molécule d'ammonia est un dipole électrique :



Lorsqu'on la place dans un champ électrique  $\vec{E} = E \vec{u}_x$  l'énergie va s'écrire :

$$E_{\text{elec.}} = -\vec{D} \cdot \vec{E} = \pm d_0 E$$

Systèmes à deux niveaux

19

## LES NEUTRINOS ONT UNE MASSE !

L'oscillation des neutrinos implique qu'ils aient une masse.

Les expériences SNO et SuperKamiokande ont permis de mettre des bornes sur ces masses.

On a :  $P_e(t) = |\langle\nu_e|\psi(t)\rangle|^2 = 1 - \sin^2 2\theta \sin^2((E_1 - E_2)t/\hbar)$   
qui dépend de la différence  $E_1 - E_2$

Pour des particules relativistes on a :  $E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2$

La vitesse des neutrinos est proche de c :  $p = \gamma m v$        $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$   
Donc  $p \gg mc$

On en déduit :  $E \approx pc (1 + \frac{m^2 c^4}{2p^2 c^2}) = pc + \frac{m^2 c^3}{2p}$

Puis :  $E_1 - E_2 \simeq \frac{(m_1^2 - m_2^2)c^3}{2p}$  : mesurable à l'aide des oscillations !

Systèmes à deux niveaux

18

## OPÉRATEUR DIPOLE

Passons maintenant au formalisme quantique pour un dipole dans un champ électrique (non quantifié)  $\mathcal{E}$ .

Si on note  $\hat{D}$  le dipole le long de l'axe x et  $\hat{W}$  l'opérateur énergie électrostatique on a :  $\hat{W} = \hat{D}\mathcal{E}$

En bonne approximation  $\hat{D}$  est diagonal dans la base  $|\psi_D\rangle, |\psi_G\rangle$



Les valeurs propres sont  $d_0, -d_0$

$$\begin{cases} \hat{D}|\psi_G\rangle = -d_0|\psi_G\rangle \\ \hat{D}|\psi_D\rangle = d_0|\psi_D\rangle \end{cases}$$

Quelle est l'action de  $\hat{D}$  dans la base  $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$  ?

$$\begin{cases} |\psi_G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_S\rangle - |\psi_A\rangle) \\ |\psi_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_S\rangle + |\psi_A\rangle) \end{cases} \quad \text{s'inverse en} \quad \begin{cases} |\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_D\rangle + |\psi_G\rangle) \\ |\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_D\rangle - |\psi_G\rangle) \end{cases} \quad \text{donc} \quad \hat{D} = d_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Systèmes à deux niveaux

20

## HAMILTONIEN TOTAL

On cherche l'Hamiltonien totale de la molécule d'ammoniac en présence d'un champ électrique dans la base  $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$  :

$$\hat{H}_{\text{tot.}} = \hat{H}_0 + \hat{W} = \frac{\hbar\omega_0}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - d_0\mathcal{E} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

On sépare les termes diagonaux (énergies propres) des termes anti-diagonaux (couplage avec le champ électrique).

Le Hamiltonien total n'est plus diagonal en présence d'un champ électrique, il faut trouver les nouveaux états propres.

On met le Hamiltonien sous une forme simple :

$$\hat{H}_{\text{tot}} = -\frac{\hbar\Omega}{2} \begin{pmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{pmatrix}$$

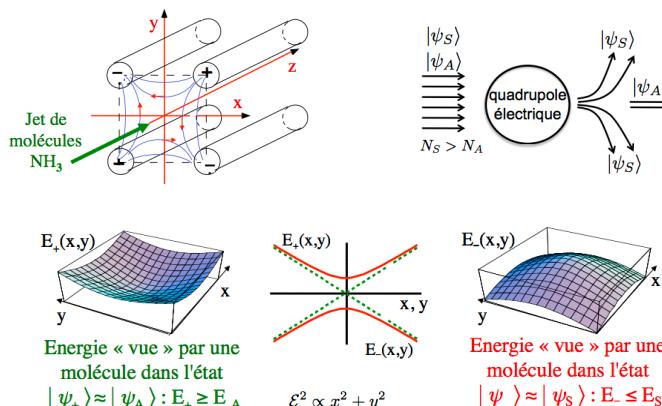
avec  $\begin{cases} \left(\frac{\hbar\Omega}{2}\right)^2 = \left(\frac{\hbar\omega_0}{2}\right)^2 + (d_0\mathcal{E})^2 & \Omega > 0 \\ \tan 2\theta = \frac{2d_0\mathcal{E}}{\hbar\omega_0} & -\pi/4 < \theta < \pi/4 \end{cases}$

Systèmes à deux niveaux

21

## PREPARATION DANS UN ETAT QUANTIQUE

On peut préparer les atomes d'ammoniac tous dans le même état  $|\psi_-\rangle, |\psi_+\rangle$  avec le dispositif suivant :



Systèmes à deux niveaux

23

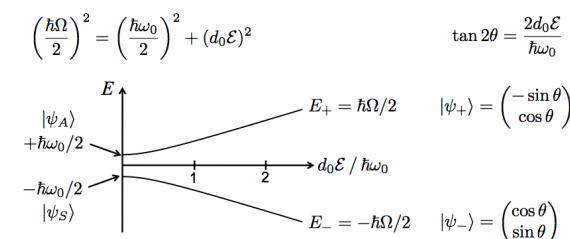
## DIAGONALISATION DU HAMILTONIEN TOTAL

Le Hamiltonien se diagonalise donc simplement dans la base  $|\psi_-\rangle, |\psi_+\rangle$

$$|\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \quad |\psi_+\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}$$

avec les valeurs propres  $\pm \hbar\Omega/2$

On peut tracer le diagramme d'énergie :



Etat + : attiré vers les champs faibles

Etat - : attiré vers les champs forts

22

## CHAMP OSCILLANT

Que se passe t'il lorsqu'on applique un champ électrique oscillant et non un champ statique ?  $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t)$

Le Hamiltonien devient explicitement dépendant du temps !

$$\hat{H}_{\text{tot}}(t) = \hat{H}_0 - \hat{D}\mathcal{E}(t)$$

Pour un système à deux niveaux on peut résoudre l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}_{\text{tot}}(t)|\psi(t)\rangle$$

On prend comme état initial  $|\psi(t)\rangle = a(t)|\psi_S\rangle + b(t)|\psi_A(t)\rangle$  avec  $a(0)=0$  et  $b(0)=1$

$$\begin{cases} i\dot{a} = -\frac{\omega_0}{2}a - \omega_1 b \cos \omega t \\ \hbar\omega_1 = d_0\mathcal{E}_0 \\ i\dot{b} = \frac{\omega_0}{2}b - \omega_1 a \cos \omega t \end{cases}$$

Systèmes à deux niveaux

24

## APPROXIMATION DU CHAMP TOURNANT

On trouve les solutions en faisant une approximation supplémentaire :

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(t) &= \mathcal{E}_0 \cos(\omega t) \\ \hbar\omega_1 &= d_0 \mathcal{E}_0\end{aligned}\quad \begin{cases} i\dot{a} = -\frac{\omega_0}{2}a - \omega_1 b \cos \omega t \\ i\dot{b} = \frac{\omega_0}{2}b - \omega_1 a \cos \omega t \end{cases}$$

Pour  $\omega_1 = 0$ , on a :  $a(t) \sim e^{i\omega_0 t/2}$        $b(t) \sim e^{-i\omega_0 t/2}$

Pour  $\omega_1 \ll \omega_0$  et  $\omega \approx \omega_0$ , on peut en bonne approx. ne garder que :

$$\begin{cases} i\dot{a} = -\frac{\omega_0}{2}a - \frac{\omega_1}{2}b (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \\ i\dot{b} = \frac{\omega_0}{2}b - \frac{\omega_1}{2}a (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \end{cases}$$

Solution pour  $\omega = \omega_0$  :

$$b(t) = e^{-i\omega_0 t/2} \cos \frac{\omega_1 t}{2}$$

Systèmes à deux niveaux

Occupation de  $|\psi_A\rangle$

$$|b(t_f)|^2 = \cos^2 \frac{\omega_1 t_f}{2}$$

25

