

# Physique Quantique

## Corrigé de la petite classe n°5

### 1 Cryptographie quantique : envoi d'un qubit

1. On exprime les quatre états possibles des bits envoyés dans la base des vecteurs propres de  $\hat{S}_z$  :

$$|+\rangle, \quad |x+\rangle = \frac{|+\rangle + |-\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |-\rangle, \quad |x-\rangle = \frac{|+\rangle - |-\rangle}{\sqrt{2}}$$

Si l'on mesure la polarisation selon un axe correspondant à un état propre du bit émis, le résultat est la valeur propre de l'état avec probabilité 1 (par exemple, si le bit a été envoyé par Alice dans l'état  $|x+\rangle$  et que Bob mesure la polarisation suivant  $Ox$ . En revanche, si Alice envoie le bit polarisé dans un état  $|x\rangle$  et que Bob mesure sa polarisation suivant l'axe  $Oz$ , alors le résultat de la mesure sera :

$$\begin{cases} +1 & \text{avec probabilité } |\langle z+|x+\rangle|^2 = 1/2 \\ -1 & \text{avec probabilité } |\langle z-|x+\rangle|^2 = 1/2 \end{cases}$$

On obtient donc finalement le tableau des résultats de mesures possibles :

état envoyé	mesure suivant $Oz$	mesure suivant $Ox$
$ z+\rangle$	+1	$\begin{cases} +1 \text{ prob } 1/2 \\ -1 \text{ prob } 1/2 \end{cases}$
$ x+\rangle$	$\begin{cases} +1 \text{ prob } 1/2 \\ -1 \text{ prob } 1/2 \end{cases}$	+1
$ z-\rangle$	-1	$\begin{cases} +1 \text{ prob } 1/2 \\ -1 \text{ prob } 1/2 \end{cases}$
$ x-\rangle$	$\begin{cases} +1 \text{ prob } 1/2 \\ -1 \text{ prob } 1/2 \end{cases}$	-1

A chaque fois qu'Alice envoie un bit, Bob a donc une chance sur deux de le mesurer correctement. Si après s'être échangés  $M$  bits, Alice et Bob se communiquent par un canal non sécurisé les polarisations respectives utilisées pour encoder et décoder, le nombre moyen de fois où ils auront utilisé une polarisation identique est donc  $M/2$ . Pour faire passer un message de  $N$  bits, il faut donc en moyenne envoyer  $2N$  bits.

Si jamais la communication a été interceptée par un troisième acteur, Eve, qui a mesuré chaque bit avant de le renvoyer vers Bob, cette mesure a modifié avec

probabilité  $1/2$  la polarisation du bit. Pour tester la sécurisation de la ligne de communication, Alice et Bob n'ont qu'à comparer (en se les transmettant sur un canal non sécurisé) la moitié des  $N$  bits qui ont été transmis avec la même polarisation pour l'encodage et le décodage. Si la comparaison montre que ces  $N/2$  bits n'ont pas été modifiés, alors la ligne est décrétée sécurisée et les  $N/2$  autres bits non comparés peuvent être utilisés pour constituer le clé de chiffrement secrète. Au total, on voit donc qu'il faut envoyer 4 fois plus de bits que la longueur du message voulu. Dans une chaîne de communication quantique, ce message est en général la clé de chiffrement d'un canal de communication classique.

2. **Formation d'un qubit** : Les matrices de Pauli sont respectivement

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Calculons donc par exemple l'action de  $\hat{A}_1$  sur  $|\Psi\rangle$  :

$$|\Psi_1\rangle = \hat{A}_1 |\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (| - + \rangle + | + - \rangle)$$

On peut ainsi résumer l'action des opérateurs  $\hat{A}_i$  dans ce tableau :

qubit envoyé	$ ++\rangle$	$ --\rangle$	$  - + \rangle$	$  + - \rangle$
$ \Psi_0\rangle$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	0	0
$ \Psi_1\rangle$	0	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$
$ \Psi_2\rangle$	0	0	$i/\sqrt{2}$	$-i/\sqrt{2}$
$ \Psi_3\rangle$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0	0

On voit donc que les  $|\Psi_i\rangle$  sont tous orthogonaux et de norme 1.

3. Les  $\hat{P}_i$  étant les projecteurs sur chacun des  $|\Psi_i\rangle$ , l'application de l'opérateur  $\hat{R}$  à  $|\Psi_k\rangle$  donne donc :

$$\hat{R} |\Psi_k\rangle = \sum_{i=0}^3 2^i \hat{P}_i |\Psi_k\rangle = \sum_{i=0}^3 2^i \delta_{ik} |\Psi_k\rangle = 2^k |\Psi_k\rangle$$

Les  $|\Psi_i\rangle$  sont donc la base de vecteurs propres de  $\hat{R}$ . Une mesure de  $\hat{R}$  sur le qubit envoyé par Alice va donc donner une des valeurs  $2^i$  de façon certaine,  $0 \leq i \leq 3$ . Cette technique permet donc de transmettre en une seule fois 4 valeurs possibles, donc deux bits d'information, grâce à un seul objet quantique formé par une paire de particules intriqués. L'intérêt est ici de pouvoir travailler sur les états intriqués dans détruire l'intrication.

## 2 Forme de la molécule d'ammoniac isolée

### 2.1 États stationnaires de la molécule d'ammoniac $\text{NH}_3$

1. Dans cet exercice, on va utiliser une représentation discrète de dimension 2 à partir de la base constituée de  $\Psi_+(x)$  et de  $\Psi_-(x)$ . Le Hamiltonien est alors représenté

par une matrice dont les éléments sont :

$$\begin{cases} H_{++} = \langle \Psi_+ | \hat{H} | \Psi_+ \rangle = \int \Psi_+^*(x) \hat{H} \Psi_+(x) dx \\ H_{--} = \langle \Psi_- | \hat{H} | \Psi_- \rangle = \int \Psi_-^*(x) \hat{H} \Psi_-(x) dx \\ H_{+-} = \langle \Psi_+ | \hat{H} | \Psi_- \rangle = \int \Psi_+^*(x) \hat{H} \Psi_-(x) dx \\ H_{-+} = \langle \Psi_- | \hat{H} | \Psi_+ \rangle = \int \Psi_-^*(x) \hat{H} \Psi_+(x) dx \end{cases}$$

Dans les intégrales précédentes, on peut effectuer le changement de variable  $x \rightarrow -x$ . On sait que  $\Psi_-(x) = \Psi_+(x)$ . Par ailleurs, le Hamiltonien est invariant dans ce changement de variable car le terme d'énergie cinétique est proportionnel à  $\hat{p}^2$  et le potentiel  $W(x)$  est pair :  $W(-x) = W(x)$ . On en déduit immédiatement l'égalité des termes diagonaux,  $H_{++} = H_{--}$ , qu'on peut poser égaux à  $E_0$ , et celles des termes non diagonaux,  $H_{+-} = H_{-+}$ , qu'on peut poser égaux à  $-a$ . De plus, l'opérateur  $\hat{H}$  étant hermitien, les termes  $E_0$  et  $a$  sont réels. Si le pic de potentiel entre les deux minima avait une hauteur infinie, la transition entre les états  $|\Psi_+\rangle$  et  $|\Psi_-\rangle$  serait impossible. Ces deux états seraient alors états propres du Hamiltonien, la matrice serait diagonale dans cette base et  $a$  serait donc nul. Lorsque cette barrière de potentiel n'est pas infinie, la molécule placée initialement dans l'un des deux états ( $|\Psi_+\rangle$  par exemple) peut effectuer une transition vers l'état symétrique ( $|\Psi_-\rangle$ ). Dès lors, ni l'un ni l'autre ne sont états propres de  $\hat{H}$ . C'est effectivement le cas quand  $a$  est non nul ; cette constante caractérise donc le couplage entre les deux états  $|\Psi_+\rangle$  et  $|\Psi_-\rangle$ . On admettra que  $a$  est positif.

2. L'équation aux valeurs propres de la matrice  $\hat{H}_P$  s'écrit  $(E_0 - E)^2 - a^2 = 0$ , ce qui donne les deux valeurs :

—  $E_F = E_0 - a$  dont le vecteur propre (normalisé) est  $\Psi_F(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_+(x) + \Psi_-(x))$ .  
—  $E_E = E_0 + a$  dont le vecteur propre (normalisé) est  $\Psi_E(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_+(x) - \Psi_-(x))$ .

Dans l'état fondamental  $|\Psi_F\rangle$  comme dans l'état excité  $|\Psi_E\rangle$ , on ne peut localiser le plan des atomes d'hydrogène d'un côté ou de l'autre de l'atome d'azote. La « forme » de la molécule dessinée sur la figure 1 de l'énoncé (figure 10.10 du livre) n'a de sens que dans les états  $|\Psi_+\rangle$  et  $|\Psi_-\rangle$  ; en revanche, les états stationnaires c'est-à-dire les états propres du Hamiltonien  $|\Psi_F\rangle$  et  $|\Psi_E\rangle$ , superpositions linéaires des précédents, ne correspondent à aucune forme. On dit qu'on a « résonance » entre les formules stéréochimiques décrivant  $|\Psi_+\rangle$  et  $|\Psi_-\rangle$ .

3. La différence entre les deux niveaux  $|\Psi_F\rangle$  et  $|\Psi_E\rangle$  vaut  $2a$ . La désexcitation du niveau supérieur conduit donc à l'émission d'un photon de fréquence  $\nu = 2a/h$ , d'où  $a = h\nu/2 = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \times 2,387/2 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} = 7,908 \cdot 10^{-24} \text{ J} = 4,94 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$ . À température ordinaire ( $T \approx 300 \text{ K}$ ), la quantité  $k_B T$  (où  $k_B$  est la constante de Boltzmann) vaut  $1/40 \text{ eV}$ . La différence des deux niveaux  $|\Psi_F\rangle$  et  $|\Psi_E\rangle$  est près de 250 fois plus petite que  $k_B T$  : en conséquence,  $\exp(-2a/k_B T) \approx 1$  et les molécules sont quasiment en égales proportions dans les deux états.

## 2.2 Comportement des molécules dans un champ électrostatique

Les atomes d'hydrogène partageant leurs électrons avec l'atome d'azote, leur plan acquiert une polarité positive, la polarité négative se situant sur l'atome d'azote. Dans les états  $|\Psi_+\rangle$  et  $|\Psi_-\rangle$ , la « forme » de la molécule est bien définie et il en est de même de la polarité. Dans cette base, l'opérateur  $\hat{D}_x$  de moment dipolaire électrique en projection sur  $Ox$  est donc diagonal et prend la forme matricielle suivante :

$$\hat{D}_x = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & -D \end{pmatrix}$$

L'énergie potentielle du dipôle vaut  $U = -\vec{D} \cdot \vec{\mathcal{E}} = -D_x \mathcal{E}_x$ , ce qui se traduit dans la base précédente par la matrice :

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} -D\mathcal{E}_x & 0 \\ 0 & D\mathcal{E}_x \end{pmatrix}$$

et le Hamiltonien total est la somme de celui de la molécule isolée ( $\hat{H}_P$ ) et de  $\hat{U}$  :

$$\hat{H} = \hat{H}_P + \hat{U} = \begin{pmatrix} E_0 - D\mathcal{E}_x & -a \\ -a & E_0 + D\mathcal{E}_x \end{pmatrix}$$

dont l'équation aux valeurs propres s'écrit  $(E_0 - E)^2 - D^2 \mathcal{E}_x^2 - a^2 = 0$ , d'où :

$$E = E_0 \pm \sqrt{a^2 + D^2 \mathcal{E}_x^2}$$

Si l'on représente graphiquement l'énergie de chaque niveau en fonction du champ électrique  $\mathcal{E}_x$ , on obtient deux branches d'hyperbole, partant pour  $\mathcal{E}_x = 0$  (avec une tangente horizontale) des deux niveaux  $E_0 - a$  (fondamental) et  $E_0 + a$  (excité) respectivement et ayant pour asymptotes les droites  $E = E_0 - D\mathcal{E}_x$  pour la première et  $E = E_0 + D\mathcal{E}_x$  pour la seconde. Quand le champ croît, les deux niveaux s'écartent : le niveau inférieur diminue et le niveau supérieur augmente.

## 2.3 Évolution de la molécule d'ammoniac libre

Dans ce problème, jusqu'à maintenant, nous avons travaillé dans le repère du centre de masse de la molécule (figure 1 de l'énoncé). Si nous considérons un jet moléculaire, nous devons ajouter à l'énergie interne et potentielle calculée plus haut l'énergie cinétique de chaque molécule. Évidemment, l'énergie totale est conservée ; la partie que nous avons calculée à la question précédente est le complément de l'énergie cinétique pour former l'énergie totale conservée : elle joue donc le rôle de l'énergie « potentielle » des problèmes classiques. Or, pour les molécules de l'état fondamental, ce « potentiel » présente un maximum pour les régions de champ nul (axe du jet) ; la moindre perturbation suffira donc à éjecter les molécules de ce type loin de l'axe. Au contraire, pour les molécules de l'état excité, le même « potentiel » présente un minimum pour les régions de champ nul ; ces molécules seront donc maintenues au voisinage de l'axe du jet, leur écart à l'axe oscillant légèrement. Alors qu'à l'entrée de l'appareil, un peu plus de 50% des molécules sont dans l'état fondamental, à la sortie, cette population a été en grande partie éjectée et la majorité du jet près de l'axe est constituée de molécules excitées. On dit alors qu'on a « inversé » les populations.