

# Physique Quantique : Petite classe n°5

## Cryptographie quantique, molécules quantiques

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

On va étudier une chaîne de communication quantique simplifiée constituée de deux acteurs, l'émetteur Alice (A) et le récepteur Bob (B). On va supposer que les bits élémentaires échangés sont encodés sur la polarisation intrinsèque de particules de spin 1/2. Par défaut, les états notés  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$  font référence aux états propres de polarisation suivant l'axe  $Oz$ .

1. **Envoi bit par bit** : Alice envoie un bit d'information en polarisant une particule, au hasard suivant  $Oz$  ou  $Ox$  de la façon suivante :

$$0 \rightarrow |z+\rangle \text{ ou } |x+\rangle \quad , \quad 1 \rightarrow |z-\rangle \text{ ou } |x-\rangle$$

Bob reçoit ces bits et les détermine en mesurant la polarisation au hasard suivant  $Oz$  ou  $Ox$ . Calculer le tableau des probabilités de mesure par Bob en fonction de l'état créé par Alice. Si Alice et Bob se communiquent par la suite les polarisations respectives qu'ils ont utilisées pour encoder et décoder, combien de bits faut-il avoir transmis en moyenne pour être sûr d'avoir fait passer au moins un message de  $N$  bits ?

2. **Formation de qubit** : on suppose qu'Alice envoie maintenant non plus les particules une par une mais par paire, les particules étant polarisées dans un état intriqué  $|\Psi\rangle$  tel que :

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

Pour encoder les entiers compris entre 0 et 3, Alice applique à cet état  $|\Psi\rangle$  les opérateurs :

$$\hat{A}_0 = I \otimes I \quad , \quad \hat{A}_i = \hat{\sigma}_i \otimes I \quad \text{pour } 1 \leq i \leq 3$$

Les  $\hat{\sigma}_i$  étant les matrices de Pauli. Le symbole  $\otimes$  exprime ici le produit tensoriel des opérateurs, chacun des opérateurs agissant sur l'une des particules de la paire. Donner les composantes des quatre états possibles  $|\Psi_i\rangle = \hat{A}_i |\Psi\rangle$  dans la base  $(|++\rangle, |--\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle)$ . En déduire les valeurs des produits hermitiens  $\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle$ .

3. Lorsque les états correspondants à (0, 1, 2, 3) arrivent chez Bob, celui mesure l'observable correspondant à l'opérateur de réception  $\hat{R}$  :

$$\hat{R} = \sum_{i=0}^3 2^i \hat{P}_i$$

où les  $\hat{P}_i$  sont les projecteurs sur les 4 états  $|\Psi_i\rangle$  possibles créés par Alice.

Calculer les résultats de cette mesure pour les 4 états possibles. Que peut-on en tirer comme conclusion d'une mesure ? Peut-on transmettre plusieurs bits simultanément avec cette technique ?

## 2 Forme de la molécule d'ammoniac isolée

Dans la molécule d'ammoniac, les trois atomes d'hydrogène (de masse  $m_H$ ) forment un triangle pratiquement rigide, dont le plan, en revanche, est très largement mobile autour du centre d'inertie de la molécule ; ce dernier est pratiquement confondu avec l'atome d'azote. On admettra que le mouvement de ce plan a lieu perpendiculairement à un axe fixe<sup>1</sup>  $Ox$  passant par l'atome d'azote où l'on place l'origine  $O$  des coordonnées (voir Figure 1). On admettra que le mouvement du point  $C$  où l'axe  $Ox$  perce le plan des atomes d'hydrogène est celui d'une particule de masse  $m = 3m_H$  soumise au potentiel de liaison covalente  $W(x)$  représenté sur la Figure 2. Par symétrie, ce potentiel est évidemment une fonction paire de  $x$ . Le hamiltonien décrivant les vibrations de la molécule  $NH_3$ , c'est-à-dire le mouvement du point  $C$ , vaut donc :  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + W(x)$  avec  $W(-x) = W(x)$  ; la variable  $p$  représente l'impulsion projetée sur l'axe  $Ox$  du système rigide des atomes d'hydrogène. En mécanique classique, il existe deux positions d'équilibre stable dont nous notons les abscisses par  $x_0$  et  $-x_0$  respectivement. Au voisinage de chacune d'elles, le potentiel peut être approximé par un potentiel harmonique :  $V_+(x)$  pour  $x \approx x_0$  et  $V_-(x)$  pour  $x \approx -x_0$ . On appelle respectivement  $\Psi_+(x)$  et  $\Psi_-(x)$ , ce qui revient à dire que :  $\langle \Psi_- | \Psi_+ \rangle \approx 0$ .

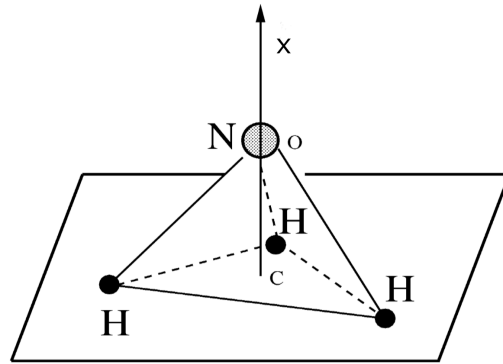


FIGURE 1 – Forme « classique » de la molécule d'ammoniac.

1. On suppose en effet que la rotation de  $Ox$  très lente par rapport aux vibrations du plan des atomes d'hydrogène.

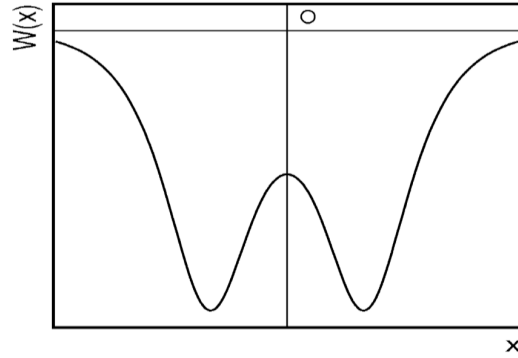


FIGURE 2 – Potentiel de liaison covalente avec deux positions d'équilibre.

## 2.1 États stationnaires de la molécule isolée

On utilise la méthode d'approximation suivante :

- On restreint l'espace des fonctions d'onde au sous-espace  $\mathcal{S}$  engendré par  $\Psi_+(x)$  et  $\Psi_-(x)$ .
  - On remplace le hamiltonien précédent  $\hat{H}$  par sa projection  $\hat{H}_P$  dans  $\mathcal{S}$ , c'est-à-dire par l'opérateur ayant le même effet que  $\hat{H}$  sur la projection d'une fonction d'onde quelconque dans  $\mathcal{S}$ .
1. On se place dans la base  $\{\Psi_+, \Psi_-\}$ . Par des arguments de symétrie, montrer que dans cette base, l'opérateur  $\hat{H}_P$  est représenté par une matrice de la forme :

$$\hat{H}_P = \begin{pmatrix} E_0 & -a \\ -a & E_0 \end{pmatrix}$$

où les quantités  $E_0$  et  $a$  sont **réelles**. Comment peut-on interpréter physiquement  $E_0$  et  $a$ ? On pourra, pour commencer, se placer dans le cas où la barrière de potentiel entre les deux positions classiques d'équilibre est infinie. On admettra dans la suite que  $a$  est **positif**.

2. Quels sont les états propres de l'énergie et les valeurs propres correspondantes? Montrer qu'on ne peut plus associer une « forme » au sens classique à la molécule d'ammoniac, ni dans son état fondamental  $\Psi_F$ , ni dans son état excité  $\Psi_E$ .
3. La transition entre l'état excité et l'état fondamental conduit à une émission **dans le domaine hertzien** à la fréquence de 23870 MHz. Calculer la quantité  $a$  en électron-Volt. Sachant que, dans le gaz  $\text{NH}_3$  à la température absolue  $T$ , le nombre de molécules dans l'état d'énergie  $E$  est proportionnel à  $\exp(-E/k_B T)$ , où  $k_B$  est la constante de Boltzmann ( $k_B = 8,62 \times 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{K}^{-1}$ ), quelles sont les proportions respectives de molécules dans chacun des deux états précédents à température ordinaire?

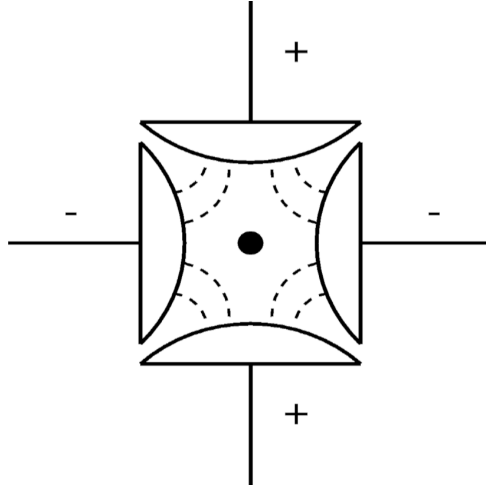


FIGURE 3 – Schéma des électrodes (section transverse).

## 2.2 Comportement des molécules dans un champ électrostatique

1. La molécule d'ammoniac est polaire. Dans quel sens le dipôle est-il orienté sur la figure 1 ? On supposera dans la suite que les états  $\Psi_+(x)$  et  $\Psi_-(x)$  sont des états propres de l'opérateur « moment dipolaire »  $\hat{D}$  avec des valeurs propres opposées ; on notera par  $D$  leur valeur absolue. La molécule est placée dans un champ électrique extérieur statique. On appelle  $\mathcal{E}_x$  sa composante sur l'axe  $Ox$ . Exprimer le nouveau hamiltonien  $\hat{H}'_P$  dans la base  $\{\Psi_+, \Psi_-\}$  en fonction de  $E_0$ ,  $a$ ,  $D$  et  $\mathcal{E}_x$ . Calculer les énergies des états stationnaires en présence du champ. Comment les niveaux d'énergie varient-ils en fonction du champ  $\mathcal{E}_x$  ?
2. Un jet de molécules d'ammoniac est envoyé dans l'axe d'un long dispositif électrostatique dont la section perpendiculaire au mouvement est représentée sur la figure 3. Montrer que les molécules dans l'état fondamental se comportent différemment des molécules dans l'état excité. Que peut-on dire des deux populations de molécules à la sortie du dispositif ?

## 2.3 Évolution de la molécule d'ammoniac libre

On considère de nouveau la molécule  $\text{NH}_3$  en l'absence de champ extérieur. On représente un état quelconque de l'espace  $\mathcal{S}$ ,  $\Psi(x, t) = c_+ \Psi_+(x) + c_-(t) \Psi_-(x)$ , par le vecteur colonne :

$$\begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix} .$$

Écrire les équations d'évolution des coefficients  $c_+(t)$  et  $c_-(t)$  avec le temps. On suppose qu'à l'instant initial ( $t = 0$ ), la molécule est dans l'état  $\Psi_+$ . Calculer aux instants ultérieurs la probabilité  $P(t)$  de la trouver dans l'état  $\Psi_-$ . Retrouver les relations d'incertitude « temps – énergie ».

## 2.4 Maser à ammoniac

Le comportement différent des molécules dans l'état fondamental et dans l'état excité a permis de réaliser pour la première fois une situation où les molécules dans ce dernier état sont majoritaires, autrement dit une **inversion de population** (*Townes, 1958*). Si le faisceau moléculaire est ensuite envoyé dans une cavité électromagnétique accordée sur la fréquence de 23870 MHz, les molécules excitées se trouvent en présence de nombreux photons identiques à ceux qu'elles sont susceptibles d'émettre. On montre en optique quantique [1] que, du fait du caractère bosonique des photons, la probabilité d'émission d'un photon par un atome ou une molécule est amplifiée proportionnellement au nombre de photons identiques déjà présents : c'est l'émission **stimulée**. Comme on a retiré du faisceau presque toutes les molécules susceptibles d'absorber ces photons (celles qui sont dans l'état fondamental), on augmente continuellement le nombre de photons dans la cavité. On obtient donc l'amplification du champ oscillant de la cavité grâce à l'émission **stimulée** des molécules excitées. On a ainsi réalisé un « amplificateur dans le domaine des micro-ondes par émission stimulée de rayonnement » [1], ou « MASER » (*Microwave Amplifier by Stimulated Emission of Radiation*). Une **horloge moléculaire** fonctionne sur le principe du maser à ammoniac, mis au point en 1958 : la cavité est alors pilotée par un quartz piézo-électrique dont la fréquence réglable est ainsi asservie à la fréquence moléculaire en exigeant toujours une intensité du champ proche de la résonance. Les transitions atomiques ou moléculaires servent maintenant d'étalons temporels.

## Références

- [1] G. Grynberg, A. Aspect et C. Fabre, *Introduction aux lasers et à l'optique quantique*, Ellipses (1997).

## 3 Réflexions à approfondir après la Petite Classe

- Représentation du spin  $\frac{1}{2}$  : états de spins ; représentation sous forme de vecteur-colonne à deux composantes ou **spineur** ; opérateurs de spin (projection selon un axe quelconque).
- Les composantes du spin sur des directions différentes ne commutent pas. Savoir exprimer un état propre de  $\hat{S}_z$  sur les états propres d'une projection quelconque.
- Mesures de spin ; calcul des probabilités des différents états finaux à partir de l'état initial (cf. décomposition selon les états propres de la composante mesurée).
- Spin et polarisation : analogies et différences avec l'optique. Le cas spécifique du photon (spin 1 mais seulement **deux états d'hélicité** ; l'hélicité est la projection du spin sur l'impulsion). Cette particularité est un effet relativiste dû à la masse nulle du photon.
- Équation de Schrödinger sous forme matricielle pour un système à deux niveaux.
- Mesure et réduction du paquet d'ondes.