

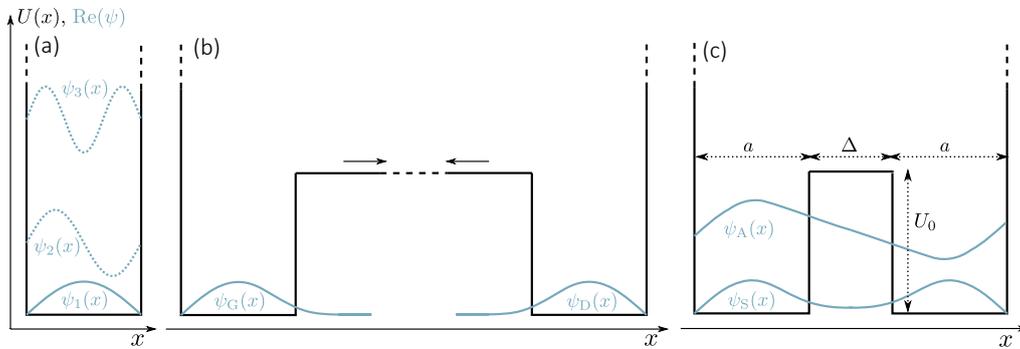
Chapitre 9

Systemes à deux états

Pour bien comprendre le début de ce chapitre il est impératif de maîtriser parfaitement le modèle des oscillateurs couplés classiques. Assurez-vous que c'est bien le cas avant d'en commencer la lecture.

Dans ce chapitre nous allons étudier en détail les propriétés d'un système quantique à deux états. Ces systèmes, parmi les plus simples que l'on trouve dans la nature, sont d'une importance capitale. Les systèmes à deux états sont par exemple à la base de la plupart des technologies quantiques dans le domaine de l'information aujourd'hui : cryptographie quantique et calcul quantique, mais ils sont aussi à l'oeuvre dans les horloges atomiques, et dans un grand nombre d'autres technologies. Ce cours se base sur l'exemple de la molécule d'ammoniac, système à deux niveaux connu pour son application au MASER à ammoniac (source cohérente de rayonnement micro-onde), qui a été une étape cruciale avant l'invention du LASER (source cohérente de rayonnement IR, visible, UV).

9.1 Rappels sur les simples et doubles puits de potentiel



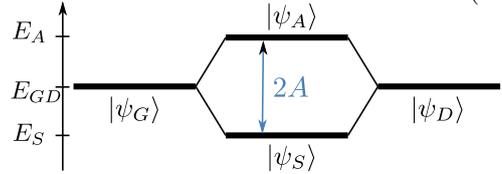
Rappelons que dans un puits de potentiel comme le puits carré infini de la figure (a), il y a une ensemble dénombrable de fonctions d'onde propres associées aux énergies $E_n = n^2\hbar^2/8ma^2$. Ici on a représenté les trois premières, d'énergies E_1 , E_2 , et E_3 . Abaissons maintenant l'une des parois de telle sorte qu'elle ait une hauteur finie. On obtient alors l'une des situation de la figure (b), suivant que l'on abaisse la paroi droite ou gauche. La fonction d'onde pénètre dans la marche de potentielle, elle est alors moins « confinée », et son énergie diminue¹. Rapprochons ensuite les deux puits de la figure (b) de telle sorte que l'on forme un double puits comme dans la figure (c). Lorsque Δ , la largeur de la barrière, commence à être de l'ordre de grandeur de a , la largeur des puits, les fonctions d'ondes ψ_G et ψ_D se recouvrent dans la barrière. Cela correspond à l'apparition d'un couplage dû à l'effet tunnel entre les deux puits. Les fonctions d'ondes propres de plus basse énergie du système de la figure (c) sont alors $\psi_S \simeq (\psi_G + \psi_D)/\sqrt{2}$ et $\psi_A \simeq (\psi_G - \psi_D)/\sqrt{2}$, respectivement symétrique et antisymétrique. Elles n'ont pas la même énergie. La différence d'énergie entre ces deux états est déterminée par le

1. En effet, l'énergie cinétique associée à cette fonction d'onde est $\langle \psi | \hat{p}^2 | \psi \rangle / 2m = -\hbar^2 \int |\nabla \psi|^2 / 2m$. Donc plus la fonction d'onde varie mollement, plus l'énergie cinétique est faible. Pour trouver cette expression, il faut procéder à une intégration par parties.

« couplage tunnel » défini² par

$$A = -\langle \psi_G | \hat{H} | \psi_D \rangle. \quad (9.1)$$

Dans le cas de la figure (b), les états propres du système sont les états gauche et droit, et ils ont la même énergie. En effet, ce sont les mêmes fonctions d'onde : pour passer de l'une à l'autre, on a simplement effectué une symétrie par rapport à l'axe vertical. En l'absence de couplage tunnel, les niveaux gauche et droit sont donc dégénérés. L'introduction du couplage tunnel lève la dégénérescence des niveaux gauche et droit. On notera E_A et E_S les énergies des états symétrique et antisymétrique. Notez qu'avec cette définition de A , on a $E_A - E_S = 2A$. Nous expliquerons d'où vient le facteur 2 plus tard. Dans la suite nous allons retrouver ces résultats dans le formalisme de Dirac.



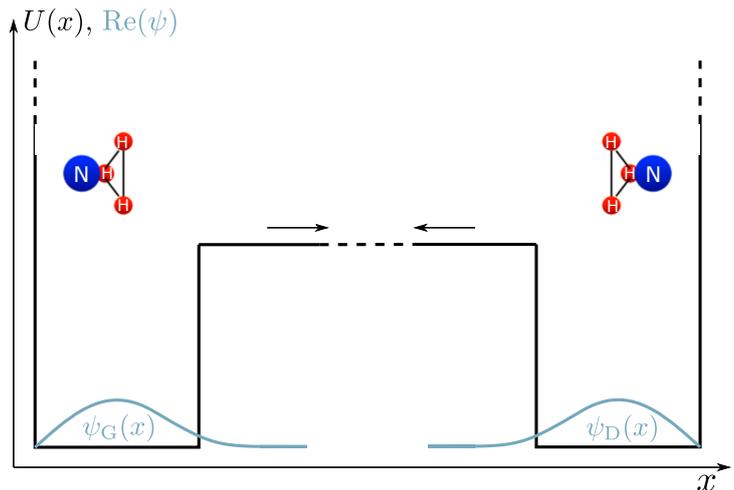
Je vous suggère d'aller expérimenter l'application Phet sur les doubles puits. Choisissez une largeur des puits de 0.1 nm et une hauteur de 10 eV, afin de n'avoir qu'un unique état lié dans les puits. Faites ensuite varier la largeur de la barrière, et visualisez l'apparition des états symétriques et antisymétriques lorsque la barrière est suffisamment fine.

9.2 Molécule d'ammoniac dans le formalisme de Dirac

9.2.1 Du système « non couplé » au système « couplé »

États propres et hamiltonien du système « non couplé » (sans effet tunnel)

La molécule d'ammoniac a une forme de parapluie. On peut isoler deux états particuliers de cette molécule, correspondant aux deux positions possibles des atomes d'hydrogène (en rouge) par rapport à l'atome d'azote (en bleu). Le passage d'un état à l'autre (retournement du parapluie) se fait grâce au couplage tunnel entre ces deux états. Pour construire l'espace de Hilbert qui permet de décrire cette situation physique, nous allons dans un premier temps, en pensée, augmenter la largeur de la barrière tunnel de sorte que $A \rightarrow 0$ (cas du système « non couplé »). Dans ce cas, le système est piégé soit dans le puits de potentiel de gauche, soit dans celui de droite (cf. figure ci-contre). Par symétrie, ces deux états que nous noterons $|\psi_G\rangle$ et $|\psi_D\rangle$ ont la même énergie E_{GD} . Donc, si le système est préparé dans l'un des deux états $|\psi_G\rangle$ ou $|\psi_D\rangle$, il n'évolue pas car ce sont des états propres du hamiltonien du système non couplé. Dans la base $\mathcal{B}_{nc} = \{|\psi_G\rangle, |\psi_D\rangle\}$, la matrice qui représente l'hamiltonien du système non couplé s'écrit



$$\left(\hat{H}_{nc} \right)_{\mathcal{B}_{nc}} = \begin{pmatrix} E_{GD} & 0 \\ 0 & E_{GD} \end{pmatrix}. \quad (9.2)$$

Dans la suite on choisira le zéro de l'énergie de telle sorte que $E_{GD} = 0$.

Hamiltonien du système « couplé » (avec effet tunnel) Considérons maintenant la situation (réelle) où le couplage tunnel est non nul, c'est-à-dire $A > 0$. Ajouter un couplage entre les états propres de \hat{H}_{nc} correspond à ajouter des termes non diagonaux dans la matrice du système non couplé

2. Ici, le signe moins sert uniquement à avoir $A > 0$. Cet élément de matrice dépend de la géométrie du problème considéré. Il peut se calculer relativement simplement dans le cas du double puits de potentiel carré, mais en général son calcul théorique est fastidieux. C'est néanmoins une grandeur que l'on peut mesurer. Nous allons voir comment procéder dans ce chapitre.

$(\widehat{H}_{\text{nc}})_{\mathcal{B}_{\text{nc}}}$. En scrutant l'Eq. 9.1, on constate que $-A$ est défini comme un terme non-diagonal de la matrice de l'hamiltonien du système couplé, écrite dans la base \mathcal{B}_{nc} . Avec $E_{GD} = 0$, on a donc

$$(\widehat{H}_c)_{\mathcal{B}_{\text{nc}}} = \begin{pmatrix} 0 & -A \\ -A & 0 \end{pmatrix}. \quad (9.3)$$

États propres de l'hamiltonien du système couplé L'ajout d'un couplage a rendu l'hamiltonien initial non diagonal. Nous allons donc trouver les nouveaux états stationnaires et leurs énergies³. Diagonalisons la matrice $(\widehat{H}_c)_{\mathcal{B}_{\text{nc}}}$. On trouve

$$(\widehat{H}_c)_{\mathcal{B}_c} = \begin{pmatrix} -A & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix}, \quad (9.4)$$

où $\mathcal{B}_c = \{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$. Les états propres du systèmes couplé s'expriment en fonction des états propres du système non couplé (et inversement) :

$$\begin{aligned} |\psi_S\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_G\rangle + |\psi_D\rangle), \text{ d'énergie } -A & |\psi_G\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_S\rangle + |\psi_A\rangle) \\ |\psi_A\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_G\rangle - |\psi_D\rangle), \text{ d'énergie } A. & |\psi_D\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_S\rangle - |\psi_A\rangle) \end{aligned} \quad (9.5)$$

L'écart en énergie entre les deux états propres du système couplé est donc bien $2A$. Par ailleurs, on voit que l'état symétrique est la combinaison linéaire avec le signe « + » et l'état antisymétrique est la combinaison linéaire avec le signe « - ». La matrice de passage entre ces deux bases est la matrice d'Hadamard. Cette matrice⁴ est $P = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$. Vous pouvez vérifier que $P^2 = \hat{1}$, c'est-à-dire que cette matrice est sa propre inverse. Un conséquence pratique de cette propriété est que le changement de base dans l'autre sens a la même forme (cf Eq. 9.5). Dans ce qui suit nous utiliserons la fréquence angulaire ω_0 associée à l'énergie de couplage tunnel, définie par

$$2A = \hbar\omega_0.$$

9.2.2 Oscillations de la molécule d'ammoniac

Évolution temporelle du système couplé préparé dans un état quelconque Supposons que le système soit dans une superposition quelconque des états propres du système couplé : $|\Psi(0)\rangle = \alpha_-(0)|\psi_S\rangle + \alpha_+(0)|\psi_A\rangle$, avec $|\alpha_-(0)|^2 + |\alpha_+(0)|^2 = 1$. Déterminons l'état du système à l'instant $t > 0$ grâce à l'équation de Schrödinger :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} &= \widehat{H}_c |\Psi(t)\rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \alpha_- \\ \alpha_+ \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -A & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_- \\ \alpha_+ \end{pmatrix} \\ i\hbar \dot{\alpha}_{\pm} &= \pm A \alpha_{\pm} \implies \alpha_{\pm}(t) = \alpha_{\pm}(0) e^{\mp iAt/\hbar} \end{aligned}$$

d'où $|\Psi(t)\rangle = \alpha_-(0) e^{i\frac{\omega_0 t}{2}} |\psi_S\rangle + \alpha_+(0) e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}} |\psi_A\rangle$

Ici, on a écrit l'équation sous forme matricielle dans la base \mathcal{B}_c . Puisque l'hamiltonien y est diagonal, on obtient deux équations différentielles indépendantes que l'on résout séparément. Nous aurions également pu conclure directement que, les états $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$ étant des états propres de \widehat{H}_c , ce sont des solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger. Pour les faire évoluer dans le temps, il faut les multiplier par le terme $e^{-iEt/\hbar}$ (cf. séparation des variables dans l'équation de Schrödinger).

3. Il faut retenir cette situation qui revient tout le temps en mécanique quantique. On a un hamiltonien diagonal auquel on ajoute un "terme de couplage" non diagonal : l'effet de ce terme est de coupler les états propres du système non couplé entre eux. Les états propres du système non couplé ne sont alors plus des états propres du système. Il faut diagonaliser l'hamiltonien pour déterminer les nouveaux états propres.

4. Souvent notée H dans le contexte du calcul quantique, notation malheureuse ici puisque cela fait penser à un hamiltonien.

On constate que l'état du système n'est pas stationnaire. Nous allons voir que la molécule oscille en fait entre les états $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$. Afin de simplifier les notations, dans la suite on notera $\alpha_{\pm}(0) \equiv \alpha_{\pm}$.

Observable « orientation » de la molécule d'ammoniac On introduit l'observable « orientation »⁵ définie par son action sur les états gauche et droit

$$\begin{aligned}\widehat{O}|\psi_G\rangle &= |\psi_G\rangle \\ \widehat{O}|\psi_D\rangle &= -|\psi_D\rangle.\end{aligned}$$

Ces équations signifient que si l'on mesure l'orientation de la molécule et que l'on trouve la valeur 1, alors la molécule est projetée dans l'état gauche et si l'on mesure -1, la molécule est projetée dans l'état droit. \widehat{O} est sans dimension et introduite de manière *ad hoc*. Dans la base \mathcal{B}_{nc} la matrice représentant \widehat{O} est diagonale :

$$\left(\widehat{O}\right)_{\mathcal{B}_{nc}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (9.6)$$

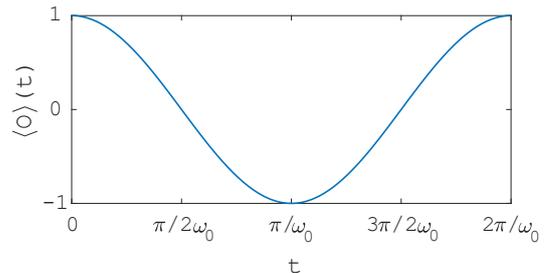
Oscillations de l'orientation moyenne de la molécule d'ammoniac Calculons la valeur moyenne de l'orientation quand le système est préparé dans l'état $|\Psi(t)\rangle$. On a $\langle\widehat{O}\rangle(t) = \langle\Psi(t)|\widehat{O}|\Psi(t)\rangle$. Pour calculer cette quantité, il faut que le bra, le ket et la matrice représentant \widehat{O} soient exprimés dans la même base. Dans ce qui précède, nous avons l'expression de $|\Psi(t)\rangle$ dans la base \mathcal{B}_c , et l'expression de la matrice de \widehat{O} dans la base \mathcal{B}_{nc} . Commençons donc par exprimer la matrice de \widehat{O} dans la base \mathcal{B}_c :

$$\left(\widehat{O}\right)_{\mathcal{B}_c} = P^{-1} \left(\widehat{O}\right)_{\mathcal{B}_{nc}} P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (9.7)$$

$$\text{d'où } \langle\widehat{O}\rangle(t) = \begin{pmatrix} \alpha_-^* e^{-i\omega_0 t/2} & \alpha_+^* e^{i\omega_0 t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_- e^{i\omega_0 t/2} \\ \alpha_+ e^{-i\omega_0 t/2} \end{pmatrix} = \alpha_-^* \alpha_+ e^{-i\omega_0 t} + \text{c.c.}$$

Si l'on choisit $\alpha_{\pm} = 1/\sqrt{2}$, c'est à dire que l'on suppose que le système a été préparé dans l'état $|\Psi(0)\rangle = |\psi_G\rangle$, on

obtient $\langle\widehat{O}\rangle(t) = \cos \omega_0 t$: le système oscille entre les états gauche et droit à la fréquence $\omega_0/2\pi$.

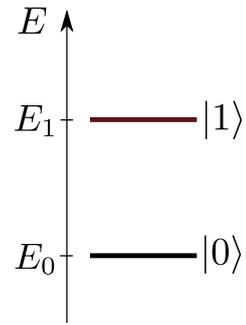


On retrouve le résultat obtenu que dans le cas classique des pendules couplés. Le système oscille entre les deux états propres du système non couplé, à une fréquence proportionnelle à l'énergie de couplage. En effet, nous avons résolu des équations similaires. Avant de passer à la suite, assurez-vous d'avoir bien compris à quelle situation expérimentale correspond le graphe ci-dessus. À chaque temps t , on effectue n fois la mesure de \widehat{O} , en ayant préalablement, avant chaque mesure, préparé le système dans l'état $|\psi_G\rangle$. Le résultat de chaque mesure est 1 ou -1 . À chaque instant t on fait ensuite la moyenne des n résultats obtenus. Pour obtenir cette courbe expérimentalement, il faut donc préparer le système puis le mesurer np fois, où p est le nombre de points sur la courbe (le nombre d'instants où l'on effectue n mesures de \widehat{O}). De la courbe expérimentale on peut ensuite déduire ω_0 et donc obtenir l'énergie de couplage tunnel A .

5. Dans les livres cette observable est souvent appelée observable « position » et notée \widehat{X} . Je trouve cela porte à confusion car cette observable n'a rien à voir ni avec l'observable position introduite dans la première partie du cours, ni avec la porte quantique à un qubit qui sera introduite plus tard et notée X . Je fais donc le choix d'introduire une notation qui n'est pas utilisée dans les livres, à ma connaissance.

9.2.3 Système à deux états et sphère de Bloch

Système à deux états La molécule d'ammoniac est un archétype de ce que l'on appelle « système à deux états ». Ce système modèle⁶ est omniprésent en physique. Par exemple, dans de nombreux protocoles d'information quantique, l'information est stockée dans un système à deux états ou *qubit* (par analogie au *bit* en informatique classique). En présence d'un système à deux états on adopte des notations génériques. Dans le contexte de l'information quantique on nommerait l'état $|\psi_S\rangle \equiv |0\rangle$, et l'état $|\psi_A\rangle \equiv |1\rangle$, l'état $|0\rangle$ correspondant à un bit classique dans l'état 0 et l'état $|1\rangle$ correspondant à un bit classique dans l'état 1.



Écriture générique de l'état d'un système à deux niveaux Nous allons montrer que l'expression générique suivante permet de décrire n'importe quel état d'un système à deux niveaux :

$$|\Psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \tag{9.8}$$

Notons d'abord que cette expression assure la normalisation de l'état, car $\cos^2(\theta/2) + \sin^2(\theta/2) = 1$. La valeur de l'angle θ permet de contrôler le poids relatifs des deux termes de la décomposition. L'angle ϕ permet de contrôler leur phase relative. L'angle θ varie *a priori* dans l'intervalle $[0, 4\pi[$. Toutefois, si l'on choisit $\theta \in [2\pi, 4\pi[$, on constate que l'on peut écrire $\theta = \alpha + 2\pi$ avec $\alpha \in [0, 2\pi[$ et

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

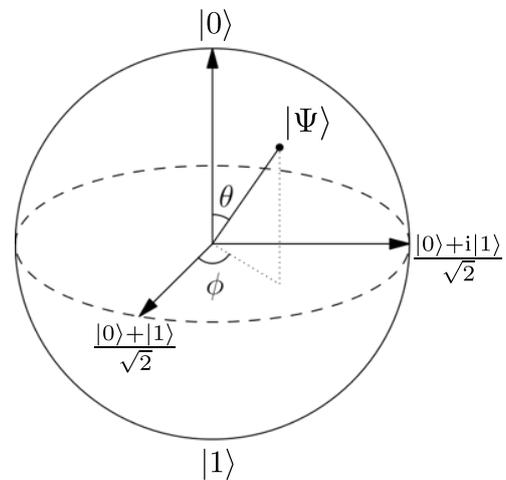
À une phase globale $e^{i\pi}$ près, on a le même état avec α et θ . On peut donc restreindre θ à $[0, 2\pi[$. Remarquons enfin que si l'on choisit $\theta \in [\pi, 2\pi[$, avec $\theta = \theta' + \pi$, l'état décrit par l'angle $(\pi - \theta') \in [0, \pi[$ est le même à une phase près, pour peu que l'on change ϕ en $\phi' = \phi + \pi$:

$$\begin{aligned} \cos \frac{\pi + \theta'}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\pi + \theta'}{2} |1\rangle &= - \sin \frac{\theta'}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \cos \frac{\theta'}{2} |1\rangle \\ &= - \left(\sin \frac{\theta'}{2} |0\rangle + e^{i(\phi + \pi)} \sin \frac{\theta'}{2} |1\rangle\right) = - \left(\cos \frac{\pi - \theta'}{2} |0\rangle + e^{i\phi'} \sin \frac{\pi - \theta'}{2} |1\rangle\right). \end{aligned}$$

Pour obtenir de façon unique tous les $|\Psi\rangle$ possibles, il suffit donc de restreindre θ à l'intervalle $[0, \pi[$ et ϕ à l'intervalle $[0, 2\pi[$.

Représentation graphique de l'état d'un système à deux niveaux : sphère de Bloch

L'ensemble de définition de ces deux angles est rigoureusement identique à celui des angles des coordonnées sphériques : chaque point de la sphère unité peut être repéré par la donnée de deux angles θ et ϕ ayant pour ensembles de définition $[0, \pi[$ et $[0, 2\pi[$, respectivement. On peut donc représenter l'état d'un système à deux états, dans un système de coordonnées sphériques, par un unique vecteur unitaire d'angles θ et ϕ . L'ensemble des états possibles décrit alors la sphère centrée en 0, et de rayon unité. Cette représentation se nomme *sphère de Bloch*. Dans cette représentation l'état $|0\rangle$ est le vecteur pointant vers le haut (axe Oz des coordonnées sphériques), et l'état $|1\rangle$ est le vecteur pointant vers le bas. Ainsi l'orthogonalité dans l'espace de Hilbert ne se traduit pas par une orthogonalité entre vecteurs de la sphère de Bloch. Les vecteurs sont en fait parallèles et de sens opposés. Remarquons



6. On emploiera indifféremment les expressions « système à deux niveaux » et « système à deux états ». La première est moins précise à mon sens, car si les deux niveaux sont dégénérés, il y a plus de deux états. Or, à ma connaissance, la notion de système à deux niveaux fait toujours références à une situation où il n'y a que deux états.

également que les superpositions des états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ ayant des poids égaux se trouvent sur l'équateur. Lorsque l'on fait tourner l'état sur l'équateur, on change la phase relative entre les deux termes de la décomposition.

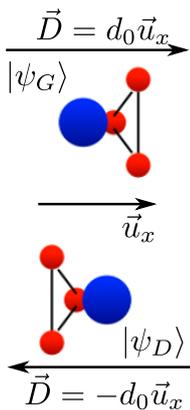
Évolution temporelle et sphère de Bloch Faisons évoluer dans le temps le ket $|\Psi\rangle = (|0\rangle + e^{i\phi}|1\rangle)/\sqrt{2}$ pointant sur l'équateur de la sphère de Bloch. On a

$$|\Psi(t)\rangle = \left(e^{-iE_0t/\hbar} |0\rangle + e^{i(\phi - E_1t/\hbar)} |1\rangle \right) / \sqrt{2} = e^{-iE_0t/\hbar} \left(|0\rangle + e^{i(\phi - (E_1 - E_0)t/\hbar)} |1\rangle \right) / \sqrt{2}.$$

L'état $|\Psi(t)\rangle$ est donc le même état que $|\Psi\rangle$, à une phase globale près, et moyennant la transformation $\phi \rightarrow \phi - (E_1 - E_0)t/\hbar$. La phase ϕ croît linéairement avec le temps : l'état précesse autour de l'axe vertical à la fréquence angulaire $\omega_0 = (E_1 - E_0)/\hbar$. Notez que ce résultat est vrai quel que soit l'angle θ (pas uniquement sur l'équateur).

Conclusion Cette représentation graphique de l'état d'un système à deux niveaux va nous servir dans toute la suite du cours. Toutes les manipulations des systèmes à deux niveaux peuvent être représentées dans la sphère de Bloch, il est donc important de bien s'en imprégner avant de passer à la suite. Nous allons maintenant voir deux manières de manipuler l'état de la molécule d'ammoniac en utilisant un champ électrique statique puis en utilisant un champ électrique dépendant du temps.

9.3 Molécule d'ammoniac dans un champ électrique statique



Opérateur moment dipolaire électrique L'azote étant plus électronégatif que l'hydrogène, la molécule d'ammoniac possède un moment dipolaire électrique dirigé de l'atome d'azote vers les atomes d'hydrogène. Si l'on choisit l'orientation du vecteur unitaire \vec{u}_x comme sur la figure ci-contre, on voit que les états droit et gauche sont des états propres de l'opérateur moment dipolaire \hat{D} , associés aux valeurs propres d_0 et $-d_0$ respectivement. La matrice représentant $\hat{D} \cdot \vec{u}_x$ dans la base \mathcal{B}_{nc} s'écrit

$$\left(\hat{D} \right)_{\mathcal{B}_{nc}} = d_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = d_0 \left(\hat{O} \right)_{\mathcal{B}_{nc}}. \quad (9.9)$$

L'opérateur moment dipolaire est donc proportionnel à l'opérateur orientation.

Interaction avec un champ électrique statique L'hamiltonien d'interaction entre un dipôle électrostatique et un champ⁷ électrique $\vec{\mathcal{E}}$ est $\hat{H}_{int} = -\hat{D} \cdot \vec{\mathcal{E}}$. Dans la suite on supposera que le champ électrique est dirigé par le même axe que le moment dipolaire : $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E} \vec{u}_x$. On a donc

$$\hat{H}_{int} = -\hat{D} \cdot \mathcal{E} = -d_0 \mathcal{E} \hat{O} = -(\hbar\omega_1/2) \hat{O}, \quad (9.10)$$

où l'on a introduit la fréquence angulaire $\hbar\omega_1 = 2d_0\mathcal{E}$, proportionnelle à l'intensité de l'interaction dipôle/champ.

Diagonalisation de l'hamiltonien total La matrice représentant l'hamiltonien total (effet tunnel + interaction avec le champ électrique) dans la base des états gauche et droit est donc

$$\left(\hat{H} \right)_{\mathcal{B}_{nc}} = \overbrace{\frac{\hbar\omega_0}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}}^{\text{couplage tunnel}} - \overbrace{\frac{\hbar\omega_1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}^{\text{couplage dipôle/champ}} \quad (9.11)$$

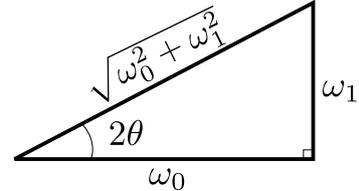
7. Dans ce cours on ne quantifiera jamais le champ électromagnétique. Seule la quantification de la matière (ici du moment dipolaire) est nécessaire pour expliquer les observations expérimentales.

Dans la base des états symétrique et antisymétrique on a alors

$$\left(\widehat{H}\right)_{\mathcal{B}_c} = \overbrace{\frac{\hbar\omega_0}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}^{\text{couplage tunnel}} - \overbrace{\frac{\hbar\omega_1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}^{\text{couplage dipôle/champ}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\omega_0 & -\omega_1 \\ -\omega_1 & \omega_0 \end{pmatrix}. \quad (9.12)$$

L'ajout d'un couplage entre les états $|\psi_A\rangle$ et $|\psi_S\rangle$ correspond à l'ajout de termes non diagonaux dans l'hamiltonien. Il faut donc diagonaliser l'hamiltonien obtenu pour connaître les nouveaux éléments propres du système. On peut trouver les valeurs propres rapidement en factorisant astucieusement par $\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}$. On obtient

$$\left(\widehat{H}\right)_{\mathcal{B}_c} = -\frac{\hbar\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}}{2} \begin{pmatrix} \omega_0/\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} & \omega_1/\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} \\ \omega_1/\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} & -\omega_0/\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} \end{pmatrix}$$



Si l'on introduit l'angle θ tel que $\tan 2\theta = \omega_1/\omega_0$ (cf schéma ci-contre), rapport entre les intensités des couplage dipôle/champ et tunnel, et la fréquence angulaire $\Omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}$, on peut récrire

l'hamiltonien

$$\left(\widehat{H}\right)_{\mathcal{B}_c} = -\frac{\hbar\Omega}{2} \begin{pmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{pmatrix} \quad (9.13)$$

Il se révèle être proportionnel à la matrice d'une réflexion du plan dont on sait qu'elle a pour valeurs propres -1 et 1. Vous pouvez vérifier ce résultat en calculant le déterminant (produit des valeurs propres) et la trace (somme des valeurs propres) de la matrice. Les énergies propres de la molécule d'ammoniac couplée à un champ électrique statique sont donc $E_{\pm} = \pm\hbar\Omega/2$. A vous de vérifier que les vecteurs propres associés sont

$$|\psi_{-}\rangle = \cos\theta |\psi_S\rangle + \sin\theta |\psi_A\rangle \quad (9.14)$$

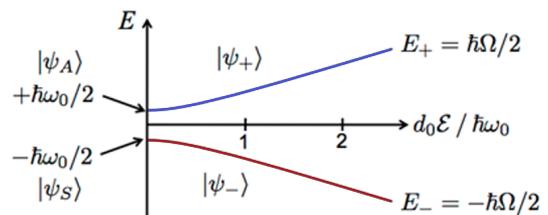
$$|\psi_{+}\rangle = -\sin\theta |\psi_S\rangle + \cos\theta |\psi_A\rangle. \quad (9.15)$$

L'hamiltonien (diagonal) dans la nouvelle base couplée $\mathcal{B}'_c \equiv \{|\psi_{-}\rangle, |\psi_{+}\rangle\}$ est donc

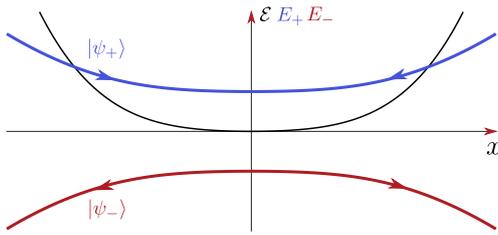
$$\left(\widehat{H}\right)_{\mathcal{B}'_c} = \frac{\hbar\Omega}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (9.16)$$

Effet d'un gradient de champ électrique : déplacement des niveaux

Sur la figure ci-contre, on a représenté les niveaux d'énergie en fonction de $\tan 2\theta = d_0\mathcal{E}/A = \omega_1/\omega_0$. On s'intéresse donc à l'évolution des niveaux d'énergie lorsque l'on fait varier \mathcal{E} (seul paramètre que l'on peut faire varier expérimentalement). Lorsque $\mathcal{E} = 0$, les états propres du système sont $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$, associés aux énergies propres



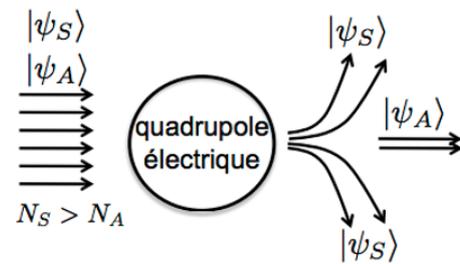
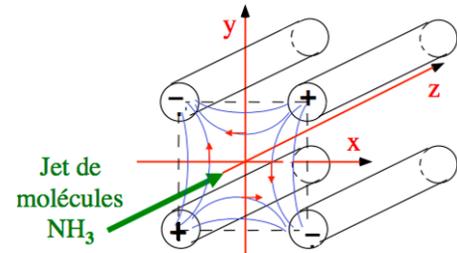
$\pm\hbar\omega_0/2$. Lorsque $\mathcal{E} \neq 0$, les nouveaux états propres sont $|\psi_{\pm}\rangle$, d'énergies $\pm\hbar\Omega/2 = \pm\hbar\sqrt{\omega_0^2/4 + (d_0\mathcal{E}/\hbar)^2}$. L'énergie de l'état $|\psi_{+}\rangle$ (resp. $|\psi_{-}\rangle$) augmente (resp. diminue) avec \mathcal{E} . Ce phénomène peut être utilisé pour exercer une force sur une molécule, dont le sens dépend de l'état dans lequel elle se trouve.



Imaginons que le champ \mathcal{E} , dans lequel baignent des molécules d'ammoniac (en noir sur la figure ci-contre), possède un minimum local suivant l'axe O_x , en $x = 0$. L'énergie d'une molécule dans l'état $|\psi_+\rangle$ (resp. $|\psi_-\rangle$) est représentée en bleu (resp. rouge). On constate que la force ressentie par les atomes : $\vec{F} = -\vec{\nabla}E_{\text{pot}} = \pm d_0\mathcal{E}\vec{u}_x$, est de sens opposé pour $|\psi_{\pm}\rangle$: elle vaut $d_0\mathcal{E}$ pour une molécule dans l'état $|\psi_+\rangle$ et $-d_0\mathcal{E}$ pour une molécule dans l'état $|\psi_-\rangle$. Une molécule dans l'état $|\psi_+\rangle$ est donc attirée par les zones de champ faible, alors qu'une molécule dans l'état $|\psi_-\rangle$ est attirée par les zones de champ fort.

Préparation de molécules dans un même état quantique

Ce phénomène peut être utilisé pour préparer un jet de molécules d'ammoniac dans l'état $|\psi_A\rangle$. Pour ce faire, on crée un minimum (non nul) de champ électrique dans deux directions O_x et O_y de l'espace en utilisant un quadrupôle électrique. Il est composé de quatre barres métalliques chargées positivement ou négativement suivant la configuration de la figure ci-contre. On dirige ensuite un jet gazeux de molécules d'ammoniac suivant l'axe O_z . L'état



initial de chaque molécule est soit $|\psi_A\rangle$, soit $|\psi_S\rangle$. Lorsqu'une molécule dans l'état $|\psi_A\rangle$ entre dans le dispositif, comme le champ n'est pas nul, elle passe continûment dans l'état $|\psi_+\rangle$. Elle est attirée par les zones de champ faible : lorsqu'elle s'éloigne de l'axe O_z , elle subit une force de rappel. Ces molécules continuent donc leur trajet suivant l'axe O_z . Lorsqu'une molécule dans l'état $|\psi_S\rangle$ entre dans le dispositif, elle passe continûment dans l'état $|\psi_-\rangle$. Elle est attirée par les zones de champ fort : elle subit une

force dans le plan xO_y , qui l'éloigne de la position $x = 0, y = 0$. Ces molécules quittent l'axe O_z et sont expulsées du quadrupôle. En sortie du quadrupôle, les molécules qui sont restées sur l'axe passent continûment de l'état $|\psi_+\rangle$ à l'état $|\psi_A\rangle$, et l'on récupère donc un jet de molécules qui sont toutes dans l'état $|\psi_A\rangle$. On dit qu'on a « préparé » l'état $|\psi_A\rangle$.

9.4 Molécule d'ammoniac dans un champ électrique oscillant

Superposition d'états : Dans la partie précédente nous avons vu comment préparer des molécules d'ammoniac dans un état propre de l'hamiltonien (l'état $|\psi_A\rangle$). Dans cette partie, nous allons voir comment, à partir de cet état initial, on peut générer une superposition arbitraire des états de la base \mathcal{B}_c .

Un hamiltonien dépendant du temps : On plonge maintenant une molécule d'ammoniac dans un champ électrique oscillant $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos \omega t$. La matrice de l'hamiltonien dans la base \mathcal{B}_c est

$$(\hat{H})_{\mathcal{B}_c} = \begin{pmatrix} -A & -d_0\mathcal{E}_0 \cos \omega t \\ -d_0\mathcal{E}_0 \cos \omega t & A \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\omega_0 & -\omega_1 \cos \omega t \\ -\omega_1 \cos \omega t & \omega_0 \end{pmatrix}, \quad (9.17)$$

avec $\hbar\omega_1 = 2d_0\mathcal{E}_0$.

C'est la première fois que nous rencontrons un hamiltonien dépendant du temps. La méthode de résolution de ce genre de problème est spécifique et fera l'objet d'un TD (le TD sur la résonance magnétique nucléaire). Dans la suite nous allons simplement donner et expliquer les résultats.

Oscillations de Rabi : cas résonant ($\omega = \omega_0$) Le cas le plus intéressant est le cas particulier où la fréquence du champ électrique ω est égale à la fréquence associée au couplage tunnel $\omega_0 = 2A$. On pourrait alors montrer que l'état du système dans la base \mathcal{B}_c s'écrit

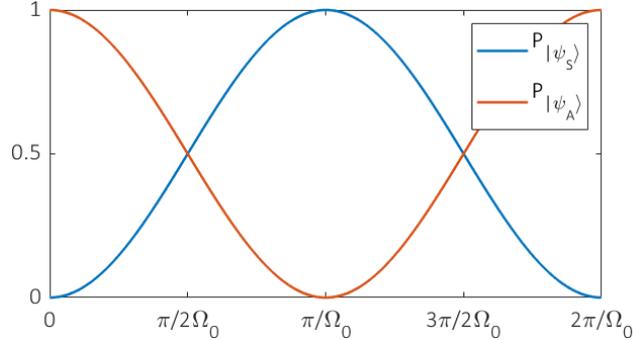
$$|\Psi(t)\rangle = i \sin(\omega_1 t/4) |\psi_S\rangle + \cos(\omega_1 t/4) e^{-i\omega_0 t} |\psi_A\rangle, \quad (9.18)$$

et que les probabilités que le système soit mesuré dans l'état $|\psi_S\rangle$ et dans l'état $|\psi_A\rangle$ sont

$$P_{|\psi_S\rangle} = \sin^2\left(\frac{\Omega_0 t}{2}\right), \quad P_{|\psi_A\rangle} = \cos^2\left(\frac{\Omega_0 t}{2}\right).$$

La fréquence de ces oscillations : $\Omega_0 = \omega_1/2$ dépend linéairement de l'amplitude du champ électrique \mathcal{E}_0 . Ces oscillations sont appelées « oscillations de Rabi », en l'honneur du physicien

américain Isidor Isaac Rabi (prix Nobel 1944). Ce phénomène permet de préparer une superposition⁸ des états $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$: il suffit d'utiliser le quadripôle de la partie précédente pour obtenir un jet de molécules dans l'état $|\psi_A\rangle$. Puis, en appliquant un champ électrique oscillant, d'amplitude connue, pendant une durée T judicieusement choisie, on peut préparer n'importe quelle superposition des deux états. Plus précisément, comme la phase relative est déterminée par ω_0 , la durée de l'interaction est déterminée par la phase relative que l'on souhaite obtenir. Ensuite, on ajuste l'amplitude du champ électrique, afin d'obtenir les amplitudes relatives désirées.



Bien que nous n'en avons pas fait la démonstration, il faut retenir le résultat principal de cette partie : dans un champ oscillant à ω_0 , l'état du système oscille entre les états de la base \mathcal{B}_c à une fréquence proportionnelle à l'amplitude du champ électrique. Ce phénomène s'appelle *oscillation de Rabi*. Il permet de préparer n'importe quelle superposition des états de la base \mathcal{B}_c , c'est-à-dire n'importe quel état dans la sphère de Bloch.

Conclusion : effet stimulé, Maser, Laser, ... Si l'on suppose la molécule initialement dans l'état $|\psi_A\rangle$, et que l'on applique un champ électrique résonant ($\omega = \omega_0$) pendant une durée $T = \pi/\Omega_0$, la molécule passe dans l'état $|\psi_S\rangle$ avec certitude. Or les deux états $|\psi_A\rangle$ et $|\psi_S\rangle$ sont séparés par l'énergie $\hbar\omega_0$. La conservation de l'énergie implique qu'au cours de ce processus, la molécule cède cette énergie. Le champ électrique a donc stimulé l'émission d'un photon d'énergie $\hbar\omega_0$. Ce phénomène se nomme *émission stimulée*. Il s'agit d'un processus réversible puisqu'en appliquant le champ pendant une durée deux fois plus longue, le photon est à nouveau absorbé. Si le champ est confiné dans une cavité, on peut obtenir une amplification du champ par émission stimulée. Ce phénomène est à la base du fonctionnement du Maser à ammoniac (source cohérente de micro-ondes), et du Laser (source cohérente de lumière visible, IR, UV). Il est donc d'une importance capitale pour un grand nombre de technologies actuelles : télécommunications optiques, médecine, usinage, soudure, découpe, télémétrie, métrologie,... et bien sûr dans la recherche il est un outil très utilisé : spectroscopie, pince optique (piégeage d'atomes et de petits objets), fusion nucléaire, ... Le laser est, avec le transistor, l'élément le plus présent dans nos vies, qui soit dû à la première révolution quantique.

8. Attention, ici on ne peut pas fixer la phase relative des états, seulement l'amplitude relative.