TD 8 - Système à deux états – Corrigé –

1 Tomographie de l'état d'une molécule d'ammoniac

Dans cet exercice nous allons voir comment on peut caractériser complètement l'état d'un système à deux niveaux d'énergie en effectuant une succession de mesures projectives. On rappelle que l'état $|\psi\rangle$ de la molécule peut toujours se ramener à la donnée de deux nombres réels ϕ et θ tels que

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\psi_S\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|\psi_A\rangle, \qquad \text{où} \qquad 0 \leq \theta \leq \pi, \qquad \text{et} \qquad -\pi < \phi \leq \pi.$$

On considère une molécule d'ammoniac préparée dans une superposition de ses deux états stationnaires $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$, d'énergies respectives $-\hbar\omega_0/2$ et $\hbar\omega_0/2$.

On prépare $N \gg 1$ molécules chacune dans le même état $|\psi\rangle$ (les coefficients ϕ et θ sont inconnus mais identiques pour chacune des molécules). Sur chaque molécule, on effectue une mesure de l'énergie.

1. Quels sont les résultats possibles pour une mesure individuelle ? Donner les probabilités correspondantes.

Solution: On ne peut obtenir que les valeurs propres du hamiltonien, soit $-\hbar\omega_0/2$ et $\hbar\omega_0/2$, avec les probabilités

$$\mathcal{P}(-\hbar\omega_0/2) = |\langle\psi_S|\psi\rangle|^2 = \cos^2\frac{\theta}{2},$$
$$\mathcal{P}(\hbar\omega_0/2) = |\langle\psi_A|\psi\rangle|^2 = \sin^2\frac{\theta}{2}.$$

2. Quelle est la valeur moyenne des résultats obtenus sur l'assemblée des N molécules ? Les coefficients ϕ et θ sont-ils complètement déterminés après ces mesures ?

Solution:
$$\langle\widehat{H}\rangle = (-\hbar\omega_0/2)\mathcal{P}(-\hbar\omega_0/2) + (\hbar\omega_0/2)\mathcal{P}(\hbar\omega_0/2)$$
$$\langle\widehat{H}\rangle = (\hbar\omega_0/2)\left(\sin^2\frac{\theta}{2} - \cos^2\frac{\theta}{2}\right) = -(\hbar\omega_0/2)\,\cos\theta.$$

Ces mesures permettent donc d'obtenir θ (restreint à $[0,\pi]$) mais pas d'obtenir ϕ. Autrement dit, la mesure de l'énergie ne permet d'obtenir des informations que sur les *populations* des états $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$ mais pas sur la *phase* de la superposition. L'énergie moyenne peut par exemple s'écrire comme

$$\langle\hat{H}\rangle = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\left[\mathcal{P}(|\psi_S\rangle) - \mathcal{P}(|\psi_A\rangle)\right].$$

Elle ne dépend donc *que* de la différence des populations dans les état $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$, au facteur $(-\hbar\omega_0)$ près. Il faut une autre mesure pour accéder à une information sur la phase de la superposition.

On prépare à nouveau N molécules dans le même état $|\psi\rangle$ et on mesure leur moment dipolaire électrique. On rappelle que l'observable moment dipolaire $\hat{d}$ a pour états propres

$$|\psi_G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_S\rangle + |\psi_A\rangle\right) \text{ et } |\psi_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_S\rangle - |\psi_A\rangle\right),$$

associés respectivement aux valeurs propres $+d_0$ et $-d_0$.

3. Quels sont les résultats possibles pour une mesure individuelle ? Donner les probabilités correspondantes.

Solution: On ne peut obtenir que les valeurs propres de $\hat{d}$, avec les probabilités

$$\mathcal{P}(+d_0) = |\langle\psi_G|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \sin\theta\cos\phi\right),$$

$$\mathcal{P}(-d_0) = |\langle\psi_D|\psi\rangle|^2 = 1 - \mathcal{P}(+d_0) = \frac{1}{2}\left(1 - \sin\theta\cos\phi\right).$$

4. Quelle est la valeur moyenne des résultats obtenus sur l'assemblée des N molécules ? Que connaissons-nous à ce niveau des coefficients ϕ et θ après les N mesures de la question 2 et les N mesures de cette question ?

Solution:

$$\langle\hat{d}\rangle = d_0|\langle\psi_G|\psi\rangle|^2 - d_0|\langle\psi_D|\psi\rangle|^2 = d_0\cos\phi\sin\theta.$$

L'angle θ est connu grâce à la mesure d'énergie, ici on déduit donc $\cos\phi$, *i.e.* la partie réelle de $e^{i\phi}$. Sa partie imaginaire est encore inconnue. Autrement dit, ϕ n'est connu qu'à un signe près : ϕ et $-\phi$ ont le même cosinus.

Pour lever toute ambigüité restante sur la détermination de ϕ et θ, on propose le protocole expérimental suivant : on prépare N molécules à $t = 0$ dans l'état $|\psi\rangle$. On les laisse évoluer pendant une durée T puis on procède de nouveau à une mesure du moment dipolaire sur chacune des molécules.

5. Écrire l'état $|\psi(t = T)\rangle$ de ces molécules juste avant la mesure.

Solution: On connait l'expression de $|\psi\rangle$ dans une base de vecteurs propres de l'hamiltonien, donc $|\psi(T)\rangle = \cos\dfrac{\theta}{2}|\psi_S\rangle e^{+i\omega_0 T/2} + \sin\dfrac{\theta}{2} e^{i\phi}|\psi_A\rangle e^{-i\omega_0 T/2}$.

6. Donner la valeur moyenne des résultats obtenus sur l'assemblée des N molécules en fonction de T.

Solution: $|\langle\psi_D|\psi\rangle|^2 = \dfrac{1}{2}|\cos\dfrac{\theta}{2} - \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i(\phi-\omega_0 T)}|^2$, et
$|\langle\psi_G|\psi\rangle|^2 = \dfrac{1}{2}|\cos\dfrac{\theta}{2} + \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i(\phi-\omega_0 T)}|^2$, d'où

$$\langle\hat{d}\rangle(T) = d_0 \sin\theta\cos(\phi - \omega_0 T).$$

On choisit de faire ce troisième ensemble de mesures à $T = \frac{\pi}{2\omega_0}$.

7. Montrer que l'état initialement inconnu à $t = 0$ est complètement déterminé si on combine les résultats des trois groupes de mesure.

Solution: $\langle\hat{d}\rangle(T = \frac{\pi}{2\omega_0}) = d_0 \sin\theta\sin\phi$. On connait alors $\sin\phi$, *i.e.* la partie imaginaire de $e^{i\phi}$. L'angle ϕ est maintenant complètement déterminé.

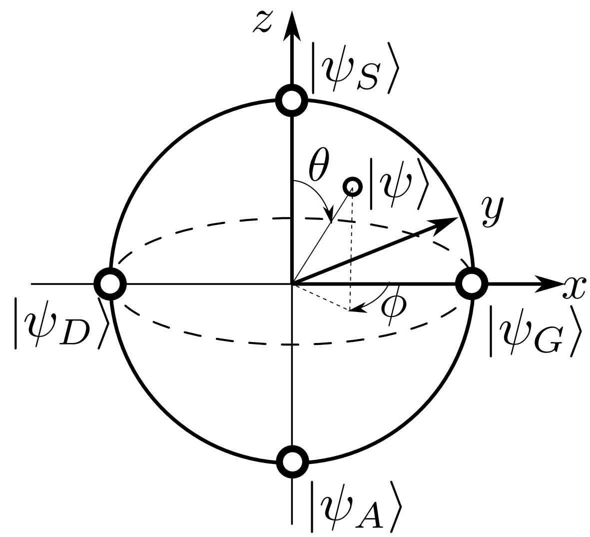
Remarque : On pourrait aussi mesurer $\langle\hat{d}\rangle(t)$ en fonction du temps t. On obtient une fonction sinusoïdale dont la phase à l'origine est précisément l'angle ϕ et dont l'amplitude est proportionnelle à $\sin\theta$. La mesure de cette sinusoïde permet donc de caractériser complètement l'état à $t = 0$.

Représentation dans la sphère de Bloch

Les angles θ et ϕ utilisés pour décrire l'état de la molécule d'ammoniac peuvent être utilisés pour représenter graphiquement l'état du système. On représente un ket $|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\psi_S\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|\psi_A\rangle$ par un point de coordonnées sphériques (θ, ϕ) sur une sphère de rayon unité, appelée *sphère de Bloch*.

8. Représenter sur la sphère de Bloch les états $|\psi_S\rangle$, $|\psi_A\rangle$, $|\psi_G\rangle$ et $|\psi_D\rangle$.

Solution: Les états $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$ sont placés aux points de coordonnées $(\theta = 0)$ (pôle nord) et $(\theta = \pi)$ (pôle sud), respectivement. Ils sont tous deux sur l'axe (Oz).
Les états $|\psi_G\rangle$ et $|\psi_D\rangle$ sont placés sur l'équateur de la sphère, aux points de coordonnées $(\theta = \pi/2, \phi = 0)$ et $(\theta = \pi/2, \phi = \pi)$, respectivement. Ils sont tous deux sur l'axe (Ox).



9. À quoi correspond, graphiquement, la valeur moyenne de l'énergie ? De même pour la valeur moyenne de l'opérateur moment dipolaire. Retrouver alors le fait que la mesure de l'énergie ne donne pas d'information sur la phase ϕ de la superposition.

Solution: L'énergie moyenne calculée précédemment est $\left\langle \hat{H} \right\rangle = -\frac{1}{2}\hbar\omega_0 \cos\theta$. Au facteur $-\hbar\omega_0/2$ près, il s'agit donc de la projection sur l'axe (Oz) du vecteur d'état dans la sphère de Bloch.

— Par exemple, l'état $|\psi_A\rangle$ correspond au pôle sud de la sphère, la projection de son vecteur position sur l'axe (Oz) est -1, son énergie est bien égale à $+\hbar\omega_0/2$.
— De même, l'état $|\psi_D\rangle$ est situé sur l'équateur de la sphère de Bloch, la projection de son vecteur position sur l'axe (Oz) est donc nulle, son énergie moyenne est bien égale à 0.

Si l'on fixe l'angle θ (latitude), modifier ϕ (longitude) revient à faire tourner le vecteur position autour de l'axe (Oz). La projection de ce vecteur sur l'axe (Oz) ne change alors jamais. Autrement dit, il n'y a aucune information sur la longitude ϕ dans la valeur de la projection sur l'axe (Oz) et donc dans la valeur de l'énergie moyenne.

Pour résumer : L'énergie moyenne, ou la différence des *populations* entre les états $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$, se lit directement sur la sphère de Bloch en regardant la projection sur l'axe (Oz). La *phase* de la superposition se lit directement sur la sphère de Bloch en regardant la longitude.

La valeur moyenne du moment dipolaire est donnée par $\langle \hat{d} \rangle = d_0 \cos\phi \, \sin\theta$. Au facteur d_0 près, il s'agit donc de la projection sur l'axe (Ox) du vecteur position sur la sphère de Bloch.

— Par exemple, l'état $|\psi_A\rangle$ correspond au pôle sud de la sphère, la projection de son vecteur position sur l'axe (Ox) est nulle, son moment dipolaire moyen est bien égale à 0.
— De même, l'état $|\psi_G\rangle$ est situé sur l'équateur de la sphère de Bloch, la projection de son vecteur position sur l'axe (Ox) est $+1$, son moment dipolaire moyen est bien égale à $+d_0$.

10. Quelle est la trajectoire sur la sphère de Bloch de l'état $|\psi(t)\rangle$? Où se situe l'état du système sur la sphère à $t = 0$ et à $T = \pi/(2\omega_0)$? Retrouver alors graphiquement le fait que, si la mesure du moment dipolaire à $t = 0$ permet de mesurer $\cos\phi$, la même mesure à $t = T$ permet de mesurer $\sin\phi$.

Solution: L'état $|\psi(t)\rangle$ s'écrit sous la forme

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}|\psi_S\rangle e^{+i\omega_0 t/2} + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}|\psi_A\rangle e^{-i\omega_0 t/2}\\ &= e^{+i\omega_0 t/2}\left(\cos\frac{\theta}{2}|\psi_S\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i(\phi-\omega_0 t)}|\psi_A\rangle\right).\end{aligned}$$

Il est donc à tout instant décrit par le point de coordonnées $(\theta, \phi(t) = \phi - \omega_0 t)$. Au cours du temps, sur la sphère de Bloch, il décrit le parallèle de latitude θ en une période de $2\pi/\omega_0$. En $t = T = \pi/(2\omega_0)$, l'état a fait un quart de tour autour de l'axe (Oz). À $t = 0$, la projection du vecteur position est $\sin\theta\ \cos\phi$. Après un quart de tour, cette même projection est $\sin\theta\ \sin\phi$.