Mécanique Quantique

TD n°2 : Système à deux niveaux

On appelle système à *deux niveaux*, un système quantique dont les états appartiennent à un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ de dimension 2.

A – Généralités

On considère un système dont le Hamiltonien peut s'écrire de la façon suivante :

$$H = H_0 + V,$$

où

$$H_0 = E_0|0\rangle\langle 0| + E_1|1\rangle\langle 1| \text{ et } W = W|1\rangle\langle 0| + W'|0\rangle\langle 1|$$

et $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ est une base orthonormée de $\mathcal{H}$.

1. représenter les opérateurs H_0, V et H sous forme de matrices dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$.

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix}; \quad V = \begin{pmatrix} 0 & W' \\ W & 0 \end{pmatrix}; \quad H = \begin{pmatrix} E_0 & W' \\ W & E_1 \end{pmatrix};$$

2. Montrer que E_0 et E_1 sont réels et que W' est le conjugué W^* de W.
H étant hermitien $\langle\psi_1|H|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|H|\psi_1\rangle^*, \forall|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$.
On en déduit que $\langle 0|H|0\rangle = \langle 0|H|0\rangle^*$ donc $E_0 = E_0^*$. de même pour E_1. Et $\langle 1|H|0\rangle = \langle 0|H|1\rangle^*$ donc $W' = W^*$.

3. On introduit les notations suivantes :

$$E_m = \frac{1}{2}(E_0 + E_1); \quad \Delta = E_1 - E_0$$

et on écrit H de la façon suivante :

$$H = E_m \mathbb{1} + \frac{\Delta}{2} K$$

où $\mathbb{1}$ est l'opérateur identité sur $\mathcal{H}$ et K est un opérateur dont on donnera la représentation matricielle dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$.

$$K = \frac{2}{\Delta}\left[H - E_m \mathbb{1}\right],$$

donc,

$$K = \begin{pmatrix} -1 & \frac{2W^*}{\Delta} \\ \frac{2W}{\Delta} & 1 \end{pmatrix}$$

4. Sans les calculer, montrer que les vecteurs propres de K sont les mêmes que les vecteurs propres de H.
Comme H et K sont hermitiens et que $[H, K] = 0$, Il existe une base de vecteurs propres commune au deux opérateurs.

5. Exprimer les valeurs propres $E_\pm$ de H en fonction de celles $\kappa_\pm$ de K.

$$E_\pm = E_m + \frac{\Delta}{2}\kappa_\pm.$$

6. Pourquoi peut on choisir $E_m = 0$, sans perte de généralité ? A partir de maintenant on choisira donc $E_m = 0$.
Changer la valeur de E_m, c'est changer l'origine à partir de laquelle on mesure l'énergie.

7. Déterminer l'expression des valeurs propre $\kappa_\pm$ en fonction de Δ et de W. Puis en déduire l'expression des valeurs propres $E_\pm$ de H.

$$\kappa_\pm = \pm\sqrt{1+4\frac{|W|^2}{\Delta^2}}$$

8. En supposant $\Delta > 0$, etudier le comportement de $E_\pm$ dans les deux cas limites de couplage faible $|W| \ll \Delta$ et de couplage fort $|W| \gg \Delta$.

$$E_\pm = \pm\frac{\Delta}{2}\sqrt{1+4\frac{|W|^2}{\Delta^2}}$$

   - Si $|W| \ll \Delta$:

$$E_\pm \simeq \pm\left[\frac{\Delta}{2}+\frac{|W|^2}{\Delta}\right]$$

   - Si $|W| \gg \Delta$:

$$E_\pm \simeq \pm\left[|W|+\frac{\Delta^2}{8\,|W|}\right].$$

9. Tracer les graphes de $E_\pm$ en fonction de Δ pour un W fixé.

10. Soient θ et φ deux angles définis de la façon suivante

$$\tan\theta = -\frac{2\,|W|}{\Delta} \quad \theta \in [0,\pi]; \quad W = |W|\,e^{-i\varphi} \quad \phi \in [0,2\pi]$$

Donner l'expression de la matrice représentant K en fonction des angles θ et φ.

$$K = \begin{pmatrix} -1 & -\tan\theta e^{i\varphi} \\ -\tan\theta e^{-i\varphi} & 1 \end{pmatrix}$$

11. Donner les expressions des valeurs propres $\kappa_\pm$ de K en fonction de θ.

$$\kappa_\pm = \pm\frac{1}{\cos\theta}$$

12. Donner l'expression des vecteurs propres $|\pm\rangle$ normés associés aux valeurs propres $E_\pm$ de H, dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ en fonction des angles θ et φ. On pourra introduire l'angle $\frac{\theta}{2}$ pour simplifier les expressions.

$$|-\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}|1\rangle$$
$$|+\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|0\rangle + \cos\frac{\theta}{2}|1\rangle$$

13. Etudier le comportement des vecteurs propres $|\pm\rangle$ dans les deux cas limites, de couplage faible ($|W| \ll \Delta$) et de couplage fort ($|W| \gg \Delta$). On suppose toujours que $\Delta > 0$.

   - *La limite $|W| \ll \Delta$ correspond à $\theta \simeq \pi$ et donc*

$$|-\rangle \simeq |1\rangle; \quad |+\rangle \simeq |0\rangle$$

   - *La limite $|W| \gg \Delta$ correspond à $\theta \simeq \pi/2$ et donc*

$$|-\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{-i\varphi}|1\rangle\right)$$
$$|+\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle - e^{-i\varphi}|1\rangle\right)$$

B – Application à la molécule d'amoniac

La molécule d'amoniac est constituée de 3 atomes d'hydrogène et d'un atome d'azote. Dans sa position d'équilibre, les 3 atomes d'hydrogène forment un triangle équilatéral et l'atome d'azote est situé sur la droite orthogonale au plan du triangle et passant par le centre de ce dernier. La molécule peut se trouver dans deux états quantiques possibles, notés $|L\rangle$ et $|R\rangle$ correspondant aux deux positions symétriques de l'atome d'azote de part et d'autre du plan des atomes d'hydrogène

On supposera que les états $\{|L\rangle, |R\rangle\}$ forment une base othonormée. Dans l'expace de Hilbert engendré par cette base, le Hamiltonien de la molécule s'exprime de la façon suivante :

$$H = E_0|L\rangle\langle L| + E_1|R\rangle\langle R| + W|L\rangle\langle R| + W^*|R\rangle\langle L|$$

où $E_{1,2} \in \mathbb{R}$ et $W \in \mathbb{C}$.

1. Soit T l'opérateur décrivant la réflexion par rapport au plan des atomes d'hydrogène. Donner l'expression matricielle de R dans la base $\{|L\rangle, |R\rangle\}$.

$$T|L\rangle = |R\rangle; \quad T|R\rangle = |L\rangle,$$

donc,

$$T = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

2. L'énergie de la molécule étant invariante par cette opération de symétrie, quel doit être la valeur du commutateur $[T, H]$?

La moyenne de l'énergie $\langle\psi|H|\psi\rangle$ dans l'état $|\psi\rangle$ doit être la même que la moyene de l'énergie dans l'état $T|\psi\rangle$, soit $\langle\psi|T^\dagger HT|\psi\rangle$. Et ceci pour tout $|\psi\rangle$ de $\mathcal{H}$. Donc

$$\forall|\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \langle\psi|H|\psi\rangle = \langle\psi|T^\dagger HT|\psi\rangle$$

Comme cette relation doit être vrai pour tout $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, on peut écrire :

$$H = T^\dagger HT.$$

De plus, $T^\dagger = T^{-1}$, donc

$$TH = HT \Leftrightarrow [H, T] = 0$$

3. En déduire des contraintes sur les valeurs de E_1, E_2 et W.

$[T, H] = 0$, *implique que $E_0 = E_1$ et $W = W^*$.*

4. Montrer qu'on peut donc considérer que la représentation matricielle de H est de la forme :

$$H = \begin{pmatrix} 0 & W \\ W & 0 \end{pmatrix} \tag{1}$$

où $W \in \mathbb{R}$.

En effet, En prenant commme origine des énergies : $E_0 = E_1 = 0$.

5. Déterminer l'expression des vecteurs propres $|+\rangle$ et $|-\rangle$ de H ainsi que les valeurs propres associées $E_\pm$ de H.

Les valeurs propres de H sont :

$$E_\pm = \pm W$$

Le vecteurs propres associés sont :

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|L\rangle \pm |R\rangle\right)$$

6. Quel est l'action de l'opérateur T sur les vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$?

$$T|+\rangle = |+\rangle; \quad T|-\rangle = -|-\rangle$$

Les vecteurs $|\pm\rangle$ sont aussi les vecteurs propres de T, associés au valeurs propre ± 1. Ceci était attendu puisque $[H,T]=0$.

C – Evolution temporelle

On suppose qu'à l'instant initial $t=0$, la molécule d'aomoniac a été préparée dans l'état $|L\rangle$. On note $|\psi(t)\rangle$ l'état de la molécule à l'instant $t \geq 0$.

1. Donner l'expression de $|\psi(t)\rangle$ dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, puis dans la base $\{|L\rangle, |R\rangle\}$.

   $|\psi\rangle(t) = e^{-iHt/\hbar}|\psi(t=0)\rangle$. *Or* $H = E_-|-\rangle\langle -| + E_+|+\rangle\langle +|$ *donc*

$$e^{-iHt/\hbar} = e^{iE_- t/\hbar}|-\rangle\langle -| + e^{iE_+ t/\hbar}|+\rangle\langle +|$$

   Sachant que $|\psi(t=0)\rangle = |L\rangle$ *:*

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|L\rangle = e^{iWt/\hbar}|-\rangle\langle -|L\rangle + e^{-iWt/\hbar}|+\rangle\langle +|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

   Or, $\langle -|L\rangle = \langle +|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$, *donc*

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{iWt/\hbar}|-\rangle + e^{-iWt/\hbar}|+\rangle\right)$$

   On en déduit que :

$$\langle L|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{iWt/\hbar}\langle L|-\rangle + e^{-iWt/\hbar}\langle L|+\rangle\right)$$
$$\langle R|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{iWt/\hbar}\langle R|-\rangle + e^{-iWt/\hbar}\langle R|+\rangle\right)$$

   En utilisant $\langle -|L\rangle = \langle +|L\rangle = \langle R|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$ *et* $\langle R|+\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}$, *on obtient*

$$\langle L|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\left(e^{iWt/\hbar} + e^{-iWt/\hbar}\right) = \cos(Wt/\hbar)$$

   et

$$\langle R|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\left(e^{iWt/\hbar} - e^{-iWt/\hbar}\right) = i\sin(Wt/\hbar).$$

   Finalement :

$$|\psi(t)\rangle = \cos(Wt/\hbar)|L\rangle + i\sin(Wt/\hbar)|R\rangle$$

2. Donner l'expression de la probabilité $P(t)$ de mesurer la molécule dans l'état $|L\rangle$ à l'instant $t>0$. On précisera l'observable qui est mesuré.

$$P(t) = |\langle L|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2(Wt/\hbar)$$

   L'observable mesuré est le projecteur sur l'état $|L\rangle$, *soit* $|L\rangle\langle L|$.

3. La longueur d'onde émise par un maser à ammoniac est $\lambda = 1.25$ cm. Calculer la fréquence correspondante et en déduire la valeur de W en eV (on rappelle que $h = 6.63 \times 10^{-34}$ J.s).

$\nu = \frac{c}{\lambda}$ *et* $h\nu = E_+ - E_- = 2W$. *Donc,*

$$W = \frac{hc}{\lambda}$$

A.N. :

$$W = \frac{6.63 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^{8}}{1.25 \times 10^{-2}} \simeq 16 \times 10^{-24}\ \mathcal{J} \simeq 1. \times 10^{-4}\ e\mathcal{V}.$$