

Examen - 14 janvier 2015 (3h)**Données utiles**

Opérateur impulsion pour un oscillateur harmonique

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})$$

Corrections à l'énergie d'un état propre $|\psi_n\rangle$ au premier et deuxième ordre en théorie des perturbations dans le cas non dégénéré, dues à une perturbation \hat{V}

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle \psi_n | \hat{V} | \psi_n \rangle$$

$$\Delta E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_n | \hat{V} | \psi_m \rangle|^2}{E_n - E_m}$$

Correction perturbative au vecteur d'état

$$|\Delta \psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m | \hat{V} | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} |\psi_m\rangle$$

Harmoniques sphériques comme états propres de l'opérateur $\hat{\mathbf{L}}^2$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \phi)$$

1 Questions courtes

Ces questions ne demandent pas de calculs élaborés!

1.1

On mesure le module carré \mathbf{J}^2 du moment angulaire total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ (moment angulaire orbitalaire plus moment angulaire de spin) pour l'électron dans un atome d'hydrogène, et on trouve le résultat $\hbar^2 J(J+1)$ avec $J = 5/2$. Que peut-on dire de la valeur propre de l'énergie? Quelles valeurs propres d'énergie sont à exclure suite à cette observation?

$J = 5/2$ peut résulter de $J = |l - S|$ ou $J = l + S$, ce qui implique $l = 2$ ou $l = 3$. Donc, avec $l < n$, ceci exclut les valeurs $n = 1, 2$ pour le nombre quantique principale.

1.2

Un oscillateur harmonique est perturbé par un terme de type $\hat{V} = -\alpha \hat{p}^3$. A quel ordre de la théorie de perturbation trouve-t-on la première correction perturbative non nulle à l'énergie d'un état propre quelconque $|n\rangle$? Et à quel ordre trouve-t-on la première correction perturbative non nulle à la fonction d'onde?

En écrivant \hat{p} en terme d'opérateurs création et destruction, on trouve que le terme de \hat{p}^3 qui change d'une façon minimale le nombre quantique n est de type $\hat{a}^\dagger \hat{a}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$. Donc la correction au premier ordre à l'énergie vaut zéro, et la première correction non nulle est au deuxième ordre. Par contre elle est au premier ordre pour la fonction d'onde.

1.3

Deux fermions identiques de spin $1/2$, décrits par les coordonnées spatiales \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 sont dans un état lié dont la fonction d'onde pour la variable relative $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ est

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \mathcal{R}(r) \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \phi)$$

où on a utilisé les coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) , et $\mathcal{Y}_{lm}(\theta, \phi)$ est une harmonique sphérique. On se rappelle de la propriété de parité des harmoniques sphériques suite à l'inversion $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$

$$\mathcal{Y}_{lm} \rightarrow (-1)^l \mathcal{Y}_{lm} .$$

Si on considère la fonction d'onde totale $\psi(\mathbf{r})|\chi\rangle$ (spatiale et de spin), quelles valeurs de l sont compatibles avec un état de spin de type $|\chi\rangle = (|\uparrow_1\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\rangle)/\sqrt{2}$? Et quelles valeurs sont compatibles avec un état $|\chi\rangle = |\uparrow_1\uparrow_2\rangle$?

l pair pour un état singulet de spin, l impair pour un état triplet.

2 Puits de potentiel sphérique

Dans cette exercice on considère une particule de masse m soumise à un puits de potentiel sphérique, c'est à dire un potentiel central $V(r)$ de la forme

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & 0 \leq r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

L'équation de Schrödinger en coordonnées polaires s'écrit

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + V(r) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \right] \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi) \quad (1)$$

On s'intéresse à l'existence d'au moins un état lié ($E < 0$) dans ce potentiel.

2.1

Justifier pourquoi même un état lié doit avoir une énergie strictement supérieure à $-V_0$. Estimer l'ordre de grandeur de $E + V_0$.

$E + V_0 \sim \hbar^2 / (2ma^2)$, correspondante à l'énergie cinétique de point zéro due au confinement dans une boîte de taille a .

2.2

On cherche une solution avec séparation de variables de la forme

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{u(r)}{r} \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \phi)$$

où \mathcal{Y}_{lm} est une harmonique sphérique. Montre que pour $l = 0$ l'équation pour u prend la forme

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) \right] u(r) = E u(r) \quad (2)$$

On utilise la propriété des harmoniques sphériques d'être fonctions propres de \hat{L}^2 , et le reste c'est de l'algèbre.

2.3

Montrer que la solution dans la région $0 \leq r \leq a$ prend la forme

$$u(r) = A \sin(kr) \quad k = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} .$$

Vérifier que $u(r) \sim r^{l+1}$ quand $r \rightarrow 0$.

La solution générale aurait la forme $Ae^{ikr} + Be^{-ikr}$, mais il est nécessaire d'imposer la condition $u(r=0) = 0$. $\sin(kr) \sim r$ quand $r \rightarrow 0$, ce qui vérifie bien le comportement $u(r) \sim r^{l+1}$.

2.4

Montrer que la solution dans la région $r > a$ prend la forme

$$u(r) = A' \exp(-\rho r) \quad \rho = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} .$$

La solution générale aurait la forme $A'e^{-\rho r} + B'e^{\rho r}$, mais il est nécessaire d'exclure la solution exponentiellement croissante.

2.5

On impose les conditions de passage $u(r = a^+) = u(r = a^-)$, $u'(r = a^+) = u'(r = a^-)$. Montrer que ces conditions mènent à l'équation

$$\tan(ka) = -\frac{k}{\rho} = -\frac{k}{\sqrt{\beta^2 - k^2}} \quad (3)$$

où β est une constante à déterminer.

Les conditions de passage prennent la forme

$$A \sin(ka) = A' \exp(-\rho a)$$

$$kA \cos(ka) = -\rho A' \exp(-\rho a)$$

d'où le résultat, avec $\beta^2 = 2mV_0/\hbar^2$.

2.6

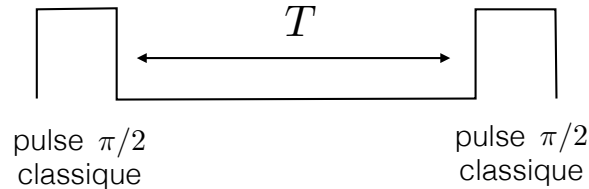
L'équation Eq. (3) admet une solution avec $k = 0$: pourquoi n'est elle pas acceptable? Tracer les fonctions au membre gauche et droite de l'Eq. (3). Montrer qu'elles admettent un point de croisement à $k \neq 0$ seulement si β excède une valeur critique. Quelle condition en tire-t-on sur la valeur de V_0 ? Quelle condition le puits de potentiel doit-il satisfaire pour qu'il existe un état lié?

Comme le membre droit de l'équation Eq. (3) diverge à $\mp\infty$ en $k = \pm\beta$, on a une solution pour $k \neq 0$ seulement si $\beta > \pi/(2a)$, comme $\tan(ka)$ diverge à $-\infty$ pour $ka = \pi/2^+$. La condition sur V_0 est $V_0 > \pi^2\hbar^2/(8ma^2)$, ce qui implique qu'un état lié existe seulement pour un puits de potentiel suffisamment profond.

3 Passage entre classique et quantique: oscillations de Rabi, interférométrie de Ramsey

Dans cet exercice, on va explorer explicitement la frontière entre monde classique et quantique dans un système assez particulier: un spin 1/2 couplé à un oscillateur harmonique. (Un tel système modélise d'une façon minimale le comportement d'un atome couplé au champ électromagnétique, mais cet aspect ne sera pas du tout important dans la suite).

Apéritif: interférométrie de Ramsey "classique"



Ceci est un rappel de la méthode de Ramsey, qui consiste en l'application de deux pulses $\pi/2$ dans un schéma de type RMN avec un évolution libre au milieu (voir schéma en Fig. 3). On considère un spin 1/2 en champ magnétique, avec Hamiltonien

$$\hat{\mathcal{H}}_s = -\omega_0 \hat{S}^z \quad (4)$$

Un pulse $\pi/2$ "classique" (c'est à dire, engendré par une combinaison de champs magnétiques classiques) est représenté ici comme la transformation

$$|\uparrow\rangle \rightarrow \frac{i|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad (5)$$

$$|\downarrow\rangle \rightarrow \frac{i|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad (6)$$

Ici $|\uparrow\rangle = |\uparrow_z\rangle$ et $|\downarrow\rangle = |\downarrow_z\rangle$.

3.1

La méthode de Ramsey consiste en

1. un pulse $\pi/2$;
2. une évolution avec le Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_s$ pendant un temps T ;
3. un pulse $\pi/2$.

Si l'état initial est $|\psi(0)\rangle = |\downarrow\rangle$, montrer que l'état final prend la forme

$$|\psi\rangle = \frac{e^{-i\omega_0 T/2}}{2} [i(1 + i e^{i\omega_0 T}) |\uparrow\rangle + (1 - i e^{i\omega_0 T}) |\downarrow\rangle] \quad (7)$$

Tracer la probabilité $P(\uparrow)$: elle montre des oscillations en fonction de T - dites franges de Ramsey.

Les états produits par la séquence de pulses $\pi/2$ et évolution libre sont

$$|\downarrow\rangle \rightarrow \frac{i|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \rightarrow \frac{e^{-i\omega_0 T/2}}{\sqrt{2}} [i e^{i\omega_0 T} |\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle] \rightarrow \frac{e^{-i\omega_0 T/2}}{2} [i(1 + i e^{i\omega_0 T}) |\uparrow\rangle + (1 - i e^{i\omega_0 T}) |\downarrow\rangle] .$$

En outre $P(\uparrow) = \frac{1}{2} [1 - \sin(\omega_0 T)]$.

Couplage entre spin et oscillateur harmonique (= champ quantique)

Maintenant on considère un spin 1/2 couplé à un oscillateur harmonique. L'état du système appartient donc à l'espace d'Hilbert conjoint $H_s \otimes H_o$, où H_s est l'espace d'Hilbert du spin 1/2, de dimension $D = 2$, engendré (par exemple) par les états $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$; et H_o est l'espace d'Hilbert de l'oscillateur harmonique, de dimension $D = \infty$, engendré (par exemple) par les états propres $|n\rangle$ avec $n = 0, 1, 2, \dots, \infty$.

Un état générique de l'ensemble spin+oscillateur s'écrit donc comme

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n=0}^{\infty} c_{\sigma,n} |\sigma\rangle \otimes |n\rangle. \quad (8)$$

Dans la suite, on abrègera le symbole $|\sigma\rangle \otimes |n\rangle$ avec $|\sigma\rangle|n\rangle$ par simplicité.

En absence d'interaction entre spin et oscillateur, leur Hamiltonien a la forme

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{\mathcal{H}}_s + \hat{\mathcal{H}}_o = -\omega_0 \hat{S}^z + \hbar\omega(\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2) \quad (9)$$

où les opérateurs \hat{S}^z et $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ sont à lire comme $\hat{S}^z \otimes \hat{\mathbb{I}}_o$ et $\hat{\mathbb{I}}_s \otimes (\hat{a}^\dagger \hat{a})$, où $\hat{\mathbb{I}}_{o(s)}$ sont les identités sur les espaces d'Hilbert du spin (de l'oscillateur).

3.2

Ecrire les valeurs propres de $\hat{\mathcal{H}}_0$ en fonction des deux nombres quantiques $m_s = \pm 1/2$ et $n = 0, 1, 2, \dots$. Sous quelle condition les niveaux d'énergie $E(-1/2, n)$ et $E(1/2, n+1)$ sont-ils dégénérés?

(On appellera cette condition *résonance* entre spin et oscillateur).

Les niveaux d'énergie sont $E(m_s, n) = -\hbar\omega_0 m_s + \hbar\omega(n + 1/2)$; on a que $E(-1/2, n) = E(1/2, n+1)$ quand $\omega = \omega_0$.

3.3

L'interaction entre spin et oscillateur a la forme

$$\hat{\mathcal{H}}_{so} = -\frac{\Omega_0}{2} (\hat{S}^+ \hat{a}^\dagger + \hat{S}^- \hat{a}) \quad (10)$$

Les deux termes du Hamiltonien d'interaction agissent comme suit:

$$\hat{S}^+ \hat{a}^\dagger |\downarrow\rangle|n\rangle = \hbar \sqrt{n+1} |\uparrow\rangle|n+1\rangle$$

$$\hat{S}^- \hat{a} |\uparrow\rangle|n+1\rangle = \hbar \sqrt{n+1} |\downarrow\rangle|n\rangle$$

Sous l'hypothèse $\Omega_0 \ll \omega, \omega_0$ on peut traiter $\hat{\mathcal{H}}_{so}$ comme perturbation.

Dans le cas de résonance (=niveaux dégénérés!), montrer que les états propres du système spin + oscillateur sont perturbés pour donner les nouveaux états propres

$$|+, n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle|n\rangle + |\uparrow\rangle|n+1\rangle)$$

$$|-, n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (-|\downarrow\rangle|n\rangle + |\uparrow\rangle|n+1\rangle)$$

avec valeurs propres associées

$$E_{\pm} = \epsilon_n - \frac{\hbar\Omega_n}{2}$$

$$E_- = \epsilon_n + \frac{\hbar\Omega_n}{2}$$

respectivement. Ici $\epsilon_n = \hbar\omega(n+1)$ et $\Omega_n = \sqrt{n+1}\Omega_0$.

Les résultats ci-dessus sortent de la diagonalisation de la matrice de $\hat{\mathcal{H}}_s + \hat{\mathcal{H}}_o + \hat{\mathcal{H}}_{so}$ sur la base réduite d'états propres dégénérés $|\downarrow\rangle|n\rangle$ et $|\uparrow\rangle|n+1\rangle$. Cette matrice a la forme

$$\begin{pmatrix} \epsilon_n & -\hbar\Omega_n/2 \\ -\hbar\Omega_n/2 & \epsilon_n \end{pmatrix} .$$

3.4

Considérons donc un état initial $|\psi(0)\rangle = |\downarrow\rangle|n\rangle$. Montrer que l'état évolué avec le Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_s + \hat{\mathcal{H}}_o + \hat{\mathcal{H}}_{so}$ (où l'on traite le couplage spin-oscillateur en théorie de perturbation) prend la forme

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\epsilon_n t/\hbar} [\cos(\Omega_n t/2) |\downarrow\rangle|n\rangle + i \sin(\Omega_n t/2) |\uparrow\rangle|n+1\rangle] .$$

Justifier donc que, si l'état initial est

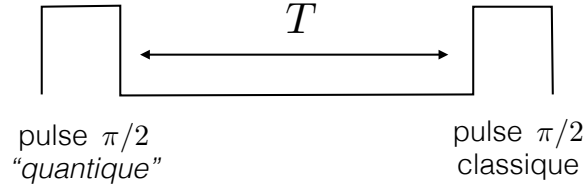
$$|\psi(0)\rangle = |\downarrow\rangle \sum_n c_n |n\rangle$$

l'état évolué prendra la forme

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-i\epsilon_n t/\hbar} c_n [\cos(\Omega_n t/2) |\downarrow\rangle|n\rangle + i \sin(\Omega_n t/2) |\uparrow\rangle|n+1\rangle] .$$

Le premier résultat est obtenu en décomposant $|\downarrow\rangle|n\rangle$ comme $(1/\sqrt{2})(|+,n\rangle - |-,n\rangle)$. Le deuxième sort de la simple superposition entre les évolutions d'états différents de type $|\downarrow\rangle|n\rangle$.

Interférométrie de Ramsey: du champ quantique au champ classique



Dans cette section finale on s'intéressera à comment l'interaction entre spin et oscillateur réalise une version purement quantique du RMN, où le spin aussi bien que le "champ" sont des objets quantiques; et comme l'interaction avec un champ quantique peut altérer les franges d'interférence de Ramsey. La séquence d'opérations qu'on étudiera est schématisée en Fig. 3.4.

3.5

Avec le couplage entre spin et oscillateur on peut aussi opérer un pulse $\pi/2$. Ce pulse correspond à l'allumage de l'interaction spin-oscillateur pendant un temps $t_{\pi/2}$ tel que $P(\uparrow, t_{\pi/2}) = 1/2$. Montrer que ceci correspond à la condition

$$\sum_n |c_n|^2 \sin^2(\Omega_n t_{\pi/2}/2) = \frac{1}{2}.$$

Si $|c_n|^2$ est fortement piqué autour de la valeur \bar{n} , justifier que

$$t_{\pi/2} \approx \frac{\pi}{2\Omega_{\bar{n}}}.$$

La condition ci-dessus correspond à la probabilité marginale d'avoir l'état $|\uparrow\rangle$ quel que soit l'état de l'oscillateur. Le deuxième résultat suit simplement si on ignore toute contribution sauf celle de $|c_{\bar{n}}|^2 \approx 1$ dans la somme.

3.6

Au temps $t_{\pi/2}$ l'état du système prend la forme

$$|\psi(t_{\pi/2})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle|\alpha_{\downarrow}\rangle + |\uparrow\rangle|\alpha_{\uparrow}\rangle)$$

où

$$|\alpha_{\downarrow}\rangle = \sqrt{2} \sum_n c_n e^{-i\epsilon_n t/\hbar} \cos(\Omega_n t_{\pi/2}/2) |n\rangle$$

$$|\alpha_{\uparrow}\rangle = i\sqrt{2} \sum_n c_n e^{-i\epsilon_n t/\hbar} \sin(\Omega_n t_{\pi/2}/2) |n+1\rangle$$

Au temps $t_{\pi/2}$ l'interaction entre spin et oscillateur est éteinte, et on imagine que le système évolue uniquement sous l'effet du Hamiltonien de spin $\hat{\mathcal{H}}_s = -\omega_0 \hat{S}^z$. Montrer qu'au temps $t_{\pi/2} + T$ l'état du système prend la forme:

$$|\psi(t_{\pi/2} + T)\rangle = \frac{e^{-i\omega_0 T/2}}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle|\alpha_{\downarrow}\rangle + e^{i\omega_0 T} |\uparrow\rangle|\alpha_{\uparrow}\rangle)$$

Ceci résulte simplement de l'évolution pilotée par $\hat{\mathcal{H}}_s$.

3.7

Au temps $t_{\pi/2} + T$ on effectue un pulse $\pi/2$ "classique", comme décrit aux Eqs. (6). Montrer que suite à ce pulse

$$|\psi\rangle = \frac{e^{-i\omega_0 T/2}}{2} [i|\uparrow\rangle (|\alpha_\downarrow\rangle + e^{i\omega_0 T}|\alpha_\uparrow\rangle) + |\downarrow\rangle (|\alpha_\downarrow\rangle - e^{i\omega_0 T}|\alpha_\uparrow\rangle)] \quad (11)$$

Montrer aussi que $P(\uparrow)$ contient un terme oscillant de franges de Ramsey dont l'amplitude est proportionnelle à $C = |\langle\alpha_\uparrow|\alpha_\downarrow\rangle|$.

Le premier résultat est la simple conséquence de la transformation linéaire associée au pulse $\pi/2$ classique. La probabilité $P(\uparrow)$ prend la forme

$$P(\uparrow) = \frac{1}{2} [1 + C \cos(\omega_0 T + \theta)]$$

où $\theta = \arg(\langle\alpha_\uparrow|\alpha_\downarrow\rangle)$.

3.8

Considérons maintenant un état initial tel que $c_{\bar{n}} = 1$, $c_{n \neq \bar{n}} = 0$ (état "fortement non-classique" de l'oscillateur harmonique). Montrer que dans ce cas les franges de Ramsey disparaissent.

Dans ce cas on a que $|\alpha_\downarrow\rangle \sim |\bar{n}\rangle$ et $|\alpha_\uparrow\rangle \sim |\bar{n} + 1\rangle$. Donc $C = 0$.

3.9

Considérons finalement que l'état initial de l'oscillateur harmonique est un état cohérent (état "classique" de l'oscillateur):

$$c_n = e^{-|\alpha|^2/2} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \quad \alpha \in \mathbb{C}$$

On admettra que

$$\begin{aligned} |\alpha_\downarrow\rangle &\approx \sqrt{2} e^{-i\omega_0 t_{\pi/2}} \cos(\Omega_{\bar{n}} t_{\pi/2}/2) |\alpha e^{-i\omega_0 t_{\pi/2}}\rangle \\ |\alpha_\uparrow\rangle &\approx i\sqrt{2} e^{-i\omega_0 t_{\pi/2}} \sin(\Omega_{\bar{n}} t_{\pi/2}/2) |\alpha e^{-i\omega_0 t_{\pi/2}}\rangle \end{aligned}$$

où $\bar{n} = |\alpha|^2$, et $|\alpha e^{-i\omega_0 t_{\pi/2}}\rangle$ est un état cohérent avec $\alpha e^{-i\omega_0 t_{\pi/2}}$ comme paramètre. Montrer que alors $C \approx 1$, et on recupère pleinement les franges de Ramsey.

En prenant $\cos(\Omega_{\bar{n}} t_{\pi/2}/2) \approx \sin(\Omega_{\bar{n}} t_{\pi/2}/2) \approx 1/\sqrt{2}$, et en exploitant la normalisation des états cohérents, on obtient le résultat cherché.

3.10 Question bonus

La Fig. 1 montre les franges de Ramsey mesurées pour différentes valeurs de $N = \langle\hat{n}\rangle$ dans l'état initial de l'oscillateur harmonique - réalisé dans l'expérience en utilisant un mode du champ électromagnétique d'une cavité, tandis que le spin 1/2 est réalisé par deux niveaux d'un atome de Rubidium. Le cas $N \gg 1$ est réalisé avec des états cohérents comme états initiaux. Expliquer ces résultats à la lumière de la discussion précédente.

Le cas $N = 0$ a un nombre bien défini de quanta d'excitations de l'oscillateur, et donc réalise un état fortement quantique pour lequel les frange de Ramsey disparaissent. Par contre pour N croissant l'incertitude sur le nombre de quanta est de plus en plus grande -

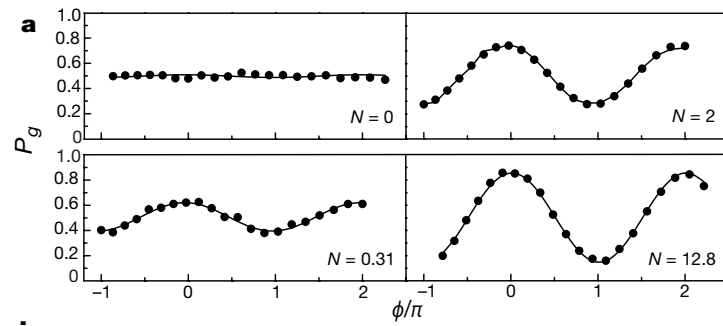


Figure 1: Franges de Ramsey pour différentes valeurs moyennes $N = \langle \hat{n} \rangle$ dans l'état initial de l'oscillateur harmonique - dans ce cas un mode du champ e.m. d'une cavité - comme mesurées dans l'expérience de P. Bertet *et al.*, Nature **411**, 166 (2001).

même pour le cas $N = 2$ - ce qui permet aux franges de réapparaître. Le cas $N = 12.8$ est réalisé par un état très proche d'un état cohérent, comme la visibilité des franges est presque 100%.