

Mécanique quantique

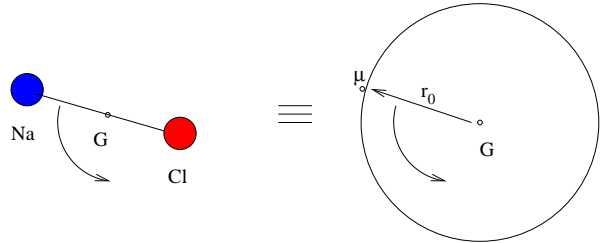
Durée 3 heures.

Documents interdits. Calculatrice autorisée. Une feuille manuscrite autorisée.

1 La molécule NaCl en champ électrique (10 points)

Dans ce problème nous négligeons les mouvement de vibration de la molécule Na-Cl. Seule la rotation rigide de la molécule est considérée. Le mouvement est donc celui d'un point de masse $\mu = (M_{Na}M_{Cl}) / (M_{Na} + M_{Cl})$ (la masse réduite), sur une sphère de rayon $r_0 = |\vec{r}_{Na} - \vec{r}_{Cl}|$, autour du centre de gravité G.

L'état classique de la molécule est donc caractérisé par un point sur la sphère, alors que **l'état quantique** est caractérisé par une fonction d'onde $\psi(\theta, \varphi)$ sur cette sphère S^2 (en coordonnées sphériques). L'espace de Hilbert des états quantiques est $\mathcal{H} = L^2(S^2)$.



1. Soit $I = \mu r_0^2$ le moment d'inertie, et $\hat{L} = \hat{r} \wedge \hat{p}$ le moment angulaire de la molécule. Montrer que le Hamiltonien décrivant ce mouvement de rotation libre est $\hat{H}_0 = \hat{L}^2 / (2I)$.
2. Sachant que les harmoniques sphériques $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, aussi notée $|l, m\rangle$, forment une base de $L^2(S^2)$, avec $l = 0, 1, \dots$ et $m = -l, \dots, +l$, et que

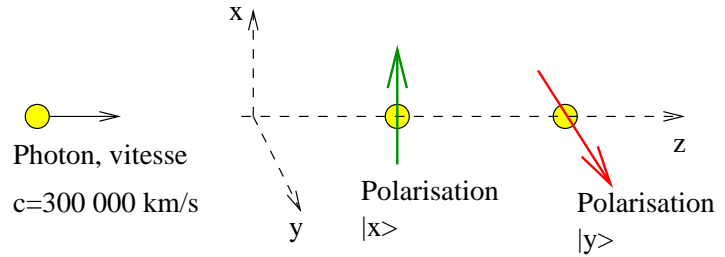
$$\hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle, \quad \hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle,$$

déduire le spectre de \hat{H}_0 (c'est à dire les niveaux d'énergie, et la multiplicité et base des espaces propres d'énergie).

3. La molécule NaCl possède un moment dipolaire électrique permanent \vec{D} . L'énergie d'interaction de la molécule avec un champ électrique externe $\vec{\mathcal{E}}$ selon z est donc $\hat{H}_1 = -\vec{D} \cdot \vec{\mathcal{E}}$. Ecrire le Hamiltonien \hat{H} de la molécule en présence de ce champ en faisant apparaître $D = |\vec{D}|$, $\mathcal{E} = |\vec{\mathcal{E}}|$ et $\cos \theta$?
4. Montrer que $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$. Comment pourra t-on utiliser cette propriété pour chercher le spectre de \hat{H} , plus facilement que dans l'espace $L^2(S^2)$ entier?
5. On suppose $\vec{\mathcal{E}}$ faible, et l'on traite \hat{H} en théorie des perturbations. Doit-on utiliser ici la théorie des perturbations pour niveaux non dégénérés ou dégénérés?
6. Calculer la correction des niveaux d'énergie $E^{(1)}$ au premier ordre? Aides : Pour un opérateur de perturbation \hat{H}_1 , et un spectre non perturbé d'énergie ϵ_n et vecteur propre $|n\rangle$, alors $E^{(1)} = \langle n | \hat{H}_1 | n \rangle$. La fonction $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ a la parité $(-1)^l$, c'est à dire $(\mathcal{P}Y_{lm})(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Comment obtenir $E^{(1)}$ sans calcul, avec un argument de symétrie?
7. Calculer la correction des niveaux d'énergie $E^{(2)}$ au deuxième ordre? Aides : Pour un opérateur de perturbation \hat{H}_1 , et un spectre non perturbé $|n\rangle, \epsilon_n$, la correction au deuxième ordre à ϵ_n est $E_n^{(2)} = \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n | \hat{H}_1 | n' \rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_{n'}}$. Utiliser : si $l' = l \pm 1$ alors $\langle l, m | \cos \hat{\theta} | l', m \rangle = 0$. Et $\langle l, m | \cos \hat{\theta} | l+1, m \rangle = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}$.
 La dégénérescence du spectre est-elle levée par $\vec{\mathcal{E}}$?

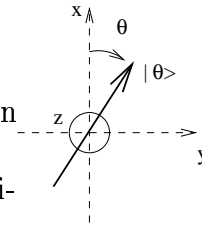
2 Inégalité de Bell et non localité de la mécanique quantique mesurée avec le photon (10 points)

Considérons un photon se déplaçant selon z . Il a deux états quantiques de polarisations $|x\rangle, |y\rangle$, correspondant aux axes x, y et formant une base orthonormée de l'espace quantique de polarisation.



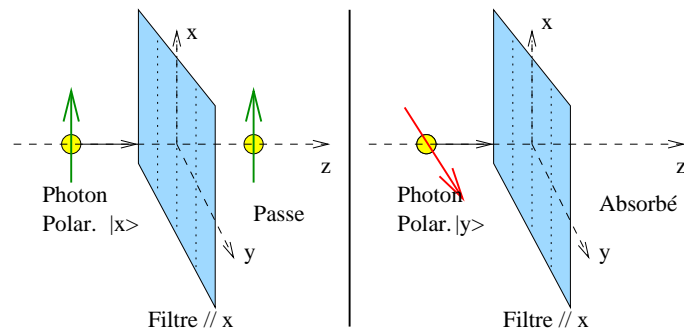
1. Donner l'expression générale d'un état quantique quelconque de polarisation noté $|P\rangle$.

Donner en particulier l'expression de l'état de polarisation rectiligne $|\theta\rangle$, faisant un angle θ avec l'axe x , dans le plan (x, y) .



2. Un filtre polarisant orienté selon l'axe x agit comme un appareil de mesure parfait : il laisse passer un photon dans l'état $|x\rangle$ avec probabilité 1, et absorbe un photon dans l'état $|y\rangle$ avec probabilité 1. D'après le postulat de la mesure, quelle est l'action de ce filtre sur un photon dans l'état général $|P\rangle$? (Préciser en particulier l'état du photon après la mesure.)

Préciser votre résultat pour le cas d'un photon dans l'état $|\theta\rangle$?



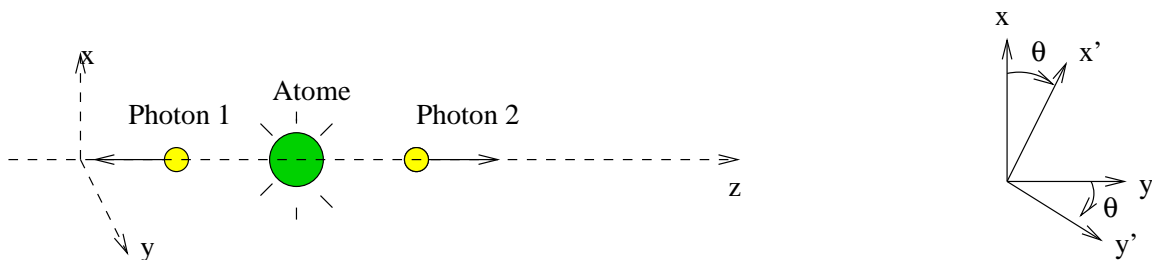
3. Comment préparer un photon dans l'état $|\theta\rangle$ (avec θ arbitraire) à l'aide d'un filtre et d'un faisceau de photons non polarisé (c'est à dire mélange statistique équiprobable des deux états de polarisation), ?
4. Un faisceau lumineux non polarisé d'intensité I_0 traverse deux filtres faisant un angle θ entre eux. Quelle est l'intensité I_1 à la sortie ?
5. Pour un filtre orienté selon x , on code $A_x = 1$ si le photon est passé et $A_x = -1$ s'il est absorbé. On note $\langle A \rangle$ la valeur moyenne, c'est-à-dire :

$$\langle A \rangle = (+1) \times \text{Proba.}(\text{passe}) + (-1) \times \text{Proba.}(\text{absorbé})$$

On définit l'observable \hat{A} associée à cette mesure par $\hat{A}|x\rangle = (+1)|x\rangle$ et $\hat{A}|y\rangle = (-1)|y\rangle$. Pour un état de polarisation $|P\rangle$ général, exprimer $\langle A \rangle$ à partir de $|P\rangle$ et \hat{A} (justifier).

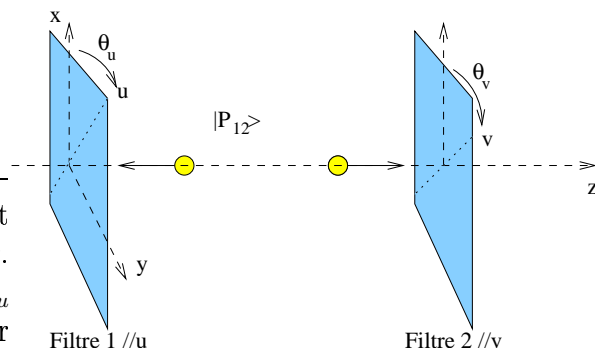
6. On considère un dispositif expérimental, où un atome se désexcite et émet deux photons (1 et 2) décrits par l'état total (enchevêtré) :

$$|P_{12}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x_1\rangle|y_2\rangle - |y_1\rangle|x_2\rangle)$$



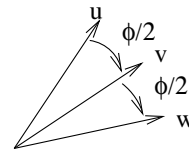
Exprimer le même état $|P_{12}\rangle$ par rapport à une autre base $|x'\rangle, |y'\rangle$ correspondant à un autre système d'axe (x', y') faisant un angle θ avec (x, y) ?

7. On effectue une mesure de polarisation sur chaque photon séparément, avec des filtres orientés respectivement selon les axes u, v faisant un angle θ_u, θ_v avec l'axe x . Le résultat de la mesure sur le photon 1 est noté A_u ($A_u = \pm 1$) et celui sur le photon 2 est noté B_v . Montrer que $\langle A_u B_v \rangle = -\cos(2(\theta_u - \theta_v))$.



8. Si l'on choisit ces angles parmi u, v, w décalés de $\phi/2$ comme sur la figure, on note

$$\Delta(\phi) = \langle A_u B_v \rangle - \langle A_u B_w \rangle + \langle A_v B_v \rangle + \langle A_v B_w \rangle$$



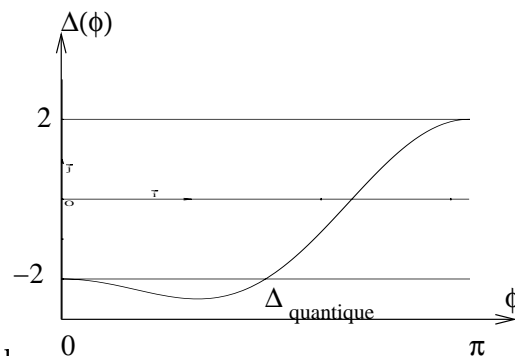
qui se mesure expérimentalement avec plusieurs mesures successives.

Montrer que d'après la mécanique quantique

$$\Delta_{quantique}(\phi) = \cos 2\phi - 2 \cos \phi - 1$$

dont l'allure est donnée sur la figure.

L'expérience (faite en 1976 par A. Aspect et al.) est en accord avec ce résultat.



9. Pour une théorie locale à variables cachées, le résultat de la mesure d'une observable O est aléatoire et en moyenne on l'exprime par $\langle O \rangle = \int O d\mu$ où μ est une mesure de probabilité.

On notera $A = A_u, A' = A_v, B = B_v, B' = B_w$ et

$$\Delta_{loc}(A, A'; B, B') = \langle AB \rangle - \langle AB' \rangle + \langle A'B \rangle + \langle A'B' \rangle$$

Dans ces notations où a été supposée la localité de la théorie ?

En utilisant $|A|, |A'|, |B|, |B'| \leq 1$, montrer l'**inégalité de Bell (1965)** $|\Delta_{loc}| \leq 2$. (Aide : commencer par $|\Delta_{loc}| \leq |\langle AB \rangle - \langle AB' \rangle| + |\langle A'B \rangle + \langle A'B' \rangle|$)

Conclusion sur la non localité de la mécanique quantique ?