Physique Quantique - 1 ° A

2h - avec documents

2 Juin 2010

Exercice 1 : oscillateur harmonique en 3 dimensions

Un électron, de masse m, est soumis à une énergie potentielle $V(x,y,z) = \frac{1}{2}k(x^2+y^2+z^2)$. On note $\psi(x,y,z,t)$ sa fonction d'onde.

Q1. Indiquer l'interprétation physique de $|\psi(x,y,z,t)|^2$.

Q2. Ecrire l'équation aux valeurs propres de l'Hamiltonien dont sont solutions les états stationnaires de l'électron.

Q3. Montrer qu'on peut résoudre cette équation en séparant les variables x, y et z, *i.e.* en cherchant des états stationnaires de la forme $\varphi(x,y,z) = f(x)g(y)h(z)$.

Q4. En déduire les trois équations dont sont séparément solutions $f(x)$, $g(y)$ et $h(z)$.

Q5. En exploitant les résultats du cours sur l'oscillateur harmonique, déterminer les niveaux d'énergie de cet oscillateur tridimensionnel, en fonction (notamment) de k et m.

Q6. Indiquer le degré de dégénérescence des 3 premiers niveaux d'énergie.

Exercice 2 : modèle simplifié de l'ion moléculaire H_2^+

La molécule (ionisée) H_2^+ est constituée de deux protons et d'un électron. On suppose le mouvement de l'électron unidimensionnel selon l'axe Ox. Le potentiel électrostatique auquel est soumis l'électron est représenté figure 1 : ce potentiel est constitué de deux puits de potentiels séparés par une barrière.

Dans toute la suite, on se limite au niveau fondamental de l'atome d'hydrogène, que l'on note E_1. On note $\varphi_I(x)$ (respectivement $\varphi_{II}(x)$) la fonction d'onde électronique **choisie normée** lorsque l'électron se trouve dans le niveau fondamental E_1 à proximité du proton I (respectivement II). Le support de $\varphi_I(x)$ (respectivement $\varphi_{II}(x)$) est l'intervalle $[-a-c,-a]$ (resp. $[a,a+c]$).

Q7. Tracer $\varphi_{II}(x)$ sur la figure 1.

Q8. Que représente physiquement la barrière de potentiel ?

Q9. Montrer que la base $\mathcal{B} = \{\varphi_I(x), \varphi_{II}(x)\}$ est orthonormée.

Toute fonction d'onde électronique peut donc s'écrire :

$$\psi(x,t) = c_I(t)\varphi_I(x) + c_{II}(t)\varphi_{II}(x) = \begin{pmatrix} c_I(t) \\ c_{II}(t) \end{pmatrix}$$

Q10. Montrer que, lorsque l'électron est décrit par cette fonction d'onde, la probabilité de présence dans le puits I vaut $|c_I(t)^2|$.

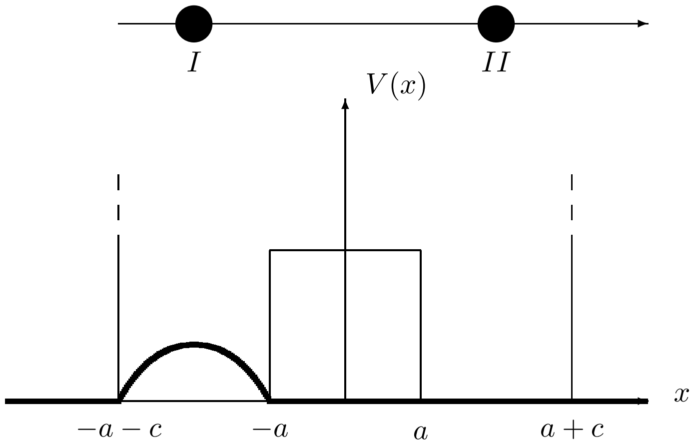

FIGURE 1 – Potentiel auquel est soumis l'électron dans la molécule H_2^+. I et II représentent la position des protons. En trait gras on a représenté la fonction d'onde $\varphi_I(x)$.

La dynamique de l'électron est décrite par l'Hamiltonien suivant :

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & A \\ A & E_1 \end{pmatrix}$$

Q11. A partir de l'équation de Schrödinger, déterminer les deux équations différentielles dont $c_I(t)$ et $c_{II}(t)$ sont solutions. Résoudre en fonction des conditions initiales $c_I(0)$ et $c_{II}(0)$. Quel rôle physique joue A ?

Q12. A quelle période l'électron oscille-t-il entre les deux protons ?

Q13. Déterminer les nouveaux niveaux d'énergie du système (on les notera E^+ et E^-). Tracer en fonction de A ($A > 0$). Comment ce diagramme permet-il d'expliquer la stabilité de la molécule ?

Exercice 3 : logique quantique

En logique booléenne *classique*, un état logique est représenté par un *bit* pouvant prendre deux valeurs, 0 **ou** 1. En logique quantique, on représente un état logique quantique par un *qubit* (quantum bit) écrit sous la forme d'un vecteur d'état quantique

$$|\psi\rangle = \mu\,|0\rangle + \nu\,|1\rangle$$

où la normalisation de $|\psi\rangle$ impose que $|\mu|^2 + |\nu|^2 = 1$.

Expérimentalement, nous considérons que les deux états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ correspondent aux deux premiers niveaux d'énergie d'une molécule diatomique modélisée comme un oscillateur harmonique de pulsation propre ω, la grandeur x représentant la distance entre les atomes de la molécule (avec par définition $x = 0$ à l'équilibre).

Q14. Donner l'expression des deux premiers niveaux d'énergie, et rappeler l'expression des fonctions d'onde correspondantes en fonction de x.

Q15. Quelle grandeur physique doit-on mesurer pour déterminer l'état du qu-bit ?

Q16. Quelle est la probabilité en fonction de μ et ν que le qu-bit soit dans l'état $|0\rangle$? dans l'état $|1\rangle$?

Une porte qu-logique U est un dispositif expérimental agissant de manière linéaire sur un qubit d'entrée $|\psi_e\rangle$, en fournissant un qubit de sortie $|\psi_s\rangle = U|\psi_e\rangle$, où U est pour l'instant une matrice 2×2 de la forme

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

On utilise dans la suite les matrices suivantes, appelées matrices de Pauli :

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \text{ et } Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

définies dans la base $\mathcal{B} = \{|0\rangle, |1\rangle$. Par exemple, la porte logique Z transforme le qubit d'entrée $|\psi_e\rangle = \mu|0\rangle + \nu|1\rangle$ en qubit de sortie $|\psi_s\rangle = \mu|0\rangle - \nu|1\rangle$.

Q17. Donner l'expression du qubit de sortie $|\psi_s\rangle$ pour la porte logique X.

Q18. On définit la porte H, dite *porte de Hadamard*, par la table de vérité suivante :

$$\begin{array}{lcl} |0\rangle & \rightarrow & (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2} \\ |1\rangle & \rightarrow & (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2} \end{array}$$

Indiquer la matrice H correspondante (à ne pas confondre avec l'Hamiltonien $\mathcal{H}$!).

Pour la question suivante, on rappelle que la matrice adjointe $U^\dagger$ d'une matrice U est la transposée de la conjuguée de cette matrice, i.e., ${}^T U^*$, et que la relation duale de $|\psi_s\rangle = U|\psi_e\rangle$ s'écrit $\langle\psi_s| = \langle\psi_e| U^\dagger$, où $\langle\psi_e| = \alpha^* \langle 0| + \beta^* \langle 1|$.

Q19. Montrer que la normalisation simultanée de $|\psi_e\rangle$ et de $|\psi_s\rangle$ impose que U soit, en toute généralité, une matrice unitaire, i.e., telle que $U\, U^\dagger = \mathbf{1}$.

Tout dispositif expérimental implémentant une porte qu-logique devra respecter cette condition dite d'unitarité.

Q20. Montrer que les portes X et H vérifient cette condition d'unitarité.

On considère désormais des portes à deux qubits, qui sont l'analogue quantique des portes logiques à deux entrées. On représente un état à deux qubits (un 2-qubit) ainsi :

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle \otimes |0\rangle + \beta|0\rangle \otimes |1\rangle + \gamma|1\rangle \otimes |0\rangle + \delta|1\rangle \otimes |1\rangle$$

où $\otimes$ représente le produit tensoriel (dans la suite on omet le symbole $\otimes$ lorsqu'il n'y pas ambiguité).

Q21. Combien faut-il de molécules pour coder un tel état ?

On appelle état intriqué un état à 2 qu-bit que l'on ne peut pas factoriser en le produit de deux états à un qu-bit.

Q22. L'état $|\psi\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle$ est-il intriqué ? Même question pour $|\psi\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle$. Justifier.

Une des portes élémentaires les plus importantes en logique quantique est la porte "Controlled-NOT" (notée U_{CN}), dont la matrice est donnée dans la base $\mathcal{B} = \{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ par

$$U_{CN} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Q23. Donner la table de vérité de la porte qu-logique U_{CN}, i.e., remplir la table suivante :

$$\begin{array}{ccc} |\psi_e\rangle & \rightarrow & |\psi_s\rangle \\ |00\rangle & \rightarrow & ? \\ |01\rangle & \rightarrow & ? \\ |10\rangle & \rightarrow & ? \\ |11\rangle & \rightarrow & ? \end{array}$$

Q24. Montrer que cette porte permet de réaliser une inversion du second qubit (B) controllée par la valeur du premier qubit (A). En déduire l'expression du 2-qubit de sortie $|\psi_s\rangle = |A'B'\rangle$ en fonction du 2-qubit d'entrée $|\psi_e\rangle = |AB\rangle$ uniquement en terme d'opérations *ou-exclusif*.