Solution de la série 6
Traitement quantique de l'information II

Exercice 1

(a) Rappel : $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$,$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$. On utilise aussi les définitions $\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ et $\sigma^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$.

$$\sigma_z \otimes \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x \otimes \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y \otimes \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

On trouve donc

$$H = \hbar J \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

pour l'Hamiltonien de Heisenberg. Remarque : cette matrice peut s'écrire

$$H = \hbar J \begin{pmatrix} \sigma_z & 2\sigma^- \\ 2\sigma^+ & -\sigma_z \end{pmatrix}.$$

(b)

$$\sigma^+ \otimes \sigma^- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^- \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

et

$$\sigma^- \otimes \sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sigma^+ & 0 \end{pmatrix}.$$

Donc on trouve aussi,

$$\hbar J \begin{pmatrix} \sigma_z & 2\sigma^- \\ 2\sigma^+ & -\sigma_z \end{pmatrix} = \hbar J \sigma_1^z \otimes \sigma_2^z + 2\hbar J \left(\sigma_1^+ \otimes \sigma_2^- + \sigma_1^- \otimes \sigma_2^+ \right).$$

(c)

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ et } \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \text{ et } \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ et } \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0.$$

(d) Etat singulet :

$$\begin{aligned} \sigma_1^z \otimes \sigma_2^z (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) &= \sigma_1^z |\uparrow\rangle \otimes \sigma_2^z |\downarrow\rangle - \sigma_1^z |\downarrow\rangle \otimes \sigma_2^z |\uparrow\rangle \\ &= -|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ &= -(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_1^+ \otimes \sigma_2^- (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) &= \sigma_1^+ |\uparrow\rangle \otimes \sigma_2^- |\downarrow\rangle - \sigma_1^+ |\downarrow\rangle \otimes \sigma_2^- |\uparrow\rangle \\ &= 0 - |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ &= -|\uparrow\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

De même,

$$\sigma_1^- \otimes \sigma_2^+ (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = +|\downarrow\uparrow\rangle.$$

On en déduit finalement

$$H|\psi_{0;0}\rangle = -\hbar J |\psi_{0;0}\rangle - 2\hbar J |\psi_{0;0}\rangle = -3\hbar J |\psi_{0;0}\rangle.$$

Le singulet est un état propre de l'Hamiltonien d'énergie $-3\hbar J$.
Etat triplet :
On trouve de façon similaire (faire le calcul !) :

$$\begin{aligned} H|\psi_{1;1}\rangle &= \hbar J |\psi_{1;1}\rangle \\ H|\psi_{1;0}\rangle &= \hbar J |\psi_{1;0}\rangle \\ H|\psi_{1;-1}\rangle &= \hbar J |\psi_{1;-1}\rangle \end{aligned}$$

Ce sont 3 états propres de même énergie $\hbar J$.
L'état fondamental, de plus basse énergie est $-3\hbar J$ (singulet) et il y a 3 états excités d'énergie $\hbar J$ (triplets). La différence d'énergie est $4\hbar J$.

(e) En présence d'un champ extérieur $\vec{B} = (0,\ 0,\ B)$

$$H = -\hbar\omega_1 \sigma^z \otimes \mathbb{I} - \hbar\omega_2 \mathbb{I} \otimes \sigma^z + \hbar J \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2.$$

et

$$\sigma^z \otimes \mathbb{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbb{I} \otimes \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Donc la matrice 4×4 est :

$$\hbar \begin{pmatrix} -\omega_1 - \omega_2 + J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\omega_1 + \omega_2 - J & 2J & 0 \\ 0 & 2J & \omega_1 - \omega_2 - J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega_1 + \omega_2 + J \end{pmatrix}.$$

Valeurs et vecteurs propres pour $\omega_1 = \omega_2$:

$$\begin{aligned} &H|\psi_{0;0}\rangle = -3\hbar J|\psi_{0;0}\rangle \\ &H|\psi_{1;1}\rangle = -\hbar(\omega_1 + \omega_2) + \hbar J|\psi_{1;1}\rangle \\ &H|\psi_{1;0}\rangle = \hbar J|\psi_{1;0}\rangle \\ &H|\psi_{1;-1}\rangle = \hbar(\omega_1 + \omega_2) + \hbar J|\psi_{1;-1}\rangle \end{aligned}$$

Commentaire : Sitôt que $B \neq 0$ la dégénérescence de l'état triplet est "levée". En physique cela s'appelle l'effet Zeeman. De plus l'état singulet $|\psi_{0;0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ est l'état de plus basse énergie tant que $\omega_0 < 2J$. Pour $\omega_0 > 2J$ c'est l'état $|\psi_{1;1}\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ qui devient l'état de plus basse énergie.

Si on fait un schéma (faites le !) des niveaux d'énergie en fonction de B (l'intensité du champ magnétique) on voit que pour une certaine intensité de B il y a un croisement entre le singulet et un des triplets. On appelle cela un croisement de niveaux. Les propriétés qualitatives d'un systeme peuvent changer lorsqu'il y a croisement de niveaux. Par exemple ici la nature même de l'état fondamental (c.a.d de plus basse énergie) change. Son spin total passe de $0 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}$ à $1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}$.

Ceci est conforme à l'intuition suivante : si B est très petit c'est l'interaction de Heisenberg qui domine et les spins ont tendance à être antiparallèles (spin total 0), par contre si B est grand les spins veulent s'aligner (spin total 1) avec ce dernier.