

Mécanique quantique avancée

Masters en Sciences Physiques

partim Th. Bastin

Année académique 2016 - 2017

Chapitre 1

Evolution des systèmes quantiques

1.1 Introduction

Soit un système physique décrit par un opérateur hamiltonien dépendant ou indépendant du temps. L'état $|\psi(t)\rangle$ de ce système est déterminé en tout instant t par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \quad (1.1)$$

où $\hat{H}(t)$ est l'opérateur hamiltonien.

Dès lors que les conditions initiales sont précisées (on connaît l'état du système en un instant $t = t_0$) et que l'équation de Schrödinger est solvable, l'état $|\psi(t)\rangle$ est parfaitement connu en tout instant t . C'est notamment le cas lorsque l'opérateur hamiltonien $\hat{H}$ est indépendant du temps *et* que ses fonctions propres $|\tilde{\phi}_n\rangle$ et valeurs propres $\tilde{E}_n$ sont parfaitement connues, c'est-à-dire que l'équation aux valeurs propres

$$\hat{H}|\tilde{\phi}_n\rangle = \tilde{E}_n|\tilde{\phi}_n\rangle \quad (1.2)$$

est solvable.

Dans ce cas, si initialement, en $t = t_0$, le système se trouve dans l'état quelconque

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n |\tilde{\phi}_n\rangle \quad (1.3)$$

alors la solution de l'équation de Schrödinger (1.1) s'écrit

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-i\tilde{E}_n(t-t_0)/\hbar} |\tilde{\phi}_n\rangle \quad (1.4)$$

Hormis le cas particulier où le système se trouve initialement dans un état propre de $\hat{H}$ (auquel cas il y reste perpétuellement à un facteur de phase global près¹), l'état du système évolue toujours au cours du temps et ne reste jamais égal à $|\psi(t_0)\rangle$.

Bien souvent cependant, et notamment en électrodynamique quantique, on ne peut calculer de manière exacte les états propres et valeurs propres de l'hamiltonien du système. On

1. Les états propres de $\hat{H}$ sont les états stationnaires du système.

doit dans ce cas avoir recours à des méthodes d'approximation pour connaître l'évolution temporelle de l'état du système.

On rencontre fréquemment la situation suivant laquelle l'hamiltonien du système s'écrit sous la forme

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}(t) \quad (1.5)$$

avec $\hat{H}_0$ un opérateur indépendant du temps dont on connaît les fonctions et valeurs propres et $\hat{W}(t)$ un opérateur dépendant ou indépendant du temps, généralement appelé *une perturbation*, qui rend l'équation de Schrödinger insoluble.

Soient $|\phi_n\rangle$ et E_n respectivement les fonctions et valeurs propres de $\hat{H}_0$. Si la perturbation est indépendante du temps, l'hamiltonien global $\hat{H}$ reste indépendant du temps et possède des fonctions et valeurs propres. Si $\hat{W} \ll \hat{H}_0$, on peut s'attendre à ce que ces fonctions et valeurs propres soient très proches de celles de $\hat{H}_0$. L'adjonction de la perturbation $\hat{W}$ modifie en quelque sorte les valeurs propres E_n d'une faible quantité et les transforme en de nouvelles valeurs : les niveaux d'énergie non perturbés subissent des déplacements ou des levées de dégénérescence. La *théorie des perturbations indépendantes du temps* permet de calculer les états propres et valeurs propres de l'hamiltonien global $\hat{H}$ sur base de la connaissance des états propres et valeurs propres de $\hat{H}_0$.

Si le système se trouve initialement dans un état propre de $\hat{H}_0$ (disons $|\phi_i\rangle$), alors il va évoluer au cours du temps conformément à l'équation de Schrödinger et $|\psi(t)\rangle$ ne va jamais rester égal à $|\phi_i\rangle$, que la perturbation $\hat{W}(t)$ dépende ou ne dépende pas du temps. Si elle dépend du temps, cette constatation est triviale ; si elle est au contraire indépendante du temps, le système évolue parce qu'il n'est pas initialement dans un des états stationnaires de l'hamiltonien global.

A un instant t donné, il se peut que le produit scalaire $\langle\phi_f|\psi(t)\rangle$, où $|\phi_f\rangle$ est un état propre de $\hat{H}_0$ différent de l'état initial $|\phi_i\rangle$, devienne non nul. A cet instant, la probabilité de trouver le système dans l'état $|\phi_f\rangle$ (appelée aussi *population* de l'état $|\phi_f\rangle$) est donnée par

$$\mathcal{P}_{if}(t) = |\langle\phi_f|\psi(t)\rangle|^2 \quad (1.6)$$

Si le système est effectivement trouvé dans cet état, on dit qu'il a effectué une *transition* de l'état initial i vers l'état final f et on dit que la perturbation $\hat{W}(t)$ *couple les états i et f* . On parle de couplage *fort* ou *faible* selon l'intensité de la perturbation. $\mathcal{P}_{if}(t)$ est appelée *probabilité de transition* de l'état i vers l'état f . On peut aussi calculer la probabilité $\mathcal{P}_{ii}(t)$ que le système reste dans l'état initial i . Cette probabilité est tout simplement donnée par

$$\mathcal{P}_{ii}(t) = |\langle\phi_i|\psi(t)\rangle|^2 = 1 - \sum_f \mathcal{P}_{if}(t) \quad (1.7)$$

Le calcul des probabilités de transition nécessite la connaissance de la fonction d'onde $|\psi(t)\rangle$ en tout instant t . Lorsque l'équation de Schrödinger n'est pas soluble et que $\hat{W}(t) \ll \hat{H}_0$, une solution approchée de la fonction d'onde et des probabilités de transitions $\mathcal{P}_{if}(t)$ est donnée par la *théorie des perturbations dépendant du temps*.

1.2 Théorie des perturbations

1.2.1 Perturbations indépendantes du temps

Soit le système physique caractérisé par l'opérateur hamiltonien indépendant du temps

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} \quad (1.8)$$

où $\hat{H}_0$ est un opérateur dont on connaît les fonctions propres et valeurs propres et $\hat{W}$ une perturbation vérifiant

$$\hat{W} \ll \hat{H}_0 \quad (1.9)$$

Soient E_n et $|\phi_n\rangle$ respectivement les valeurs propres et fonctions propres de $\hat{H}_0$ (que l'on suppose connues) :

$$\hat{H}_0|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad (1.10)$$

et $\tilde{E}_n$ et $|\tilde{\phi}_n\rangle$ respectivement les valeurs propres et fonctions propres de $\hat{H}$ dont l'équation aux valeurs propres

$$\hat{H}|\tilde{\phi}_n\rangle = \tilde{E}_n|\tilde{\phi}_n\rangle \quad (1.11)$$

est supposée insoluble.

La théorie des perturbations indépendantes du temps exprime $\tilde{E}_n$ sous la forme d'une série (dite de perturbation), dont les termes s'amenuisent au fur et à mesure que l'on progresse dans la série :

$$\tilde{E}_n = E_n + \delta E_n^{(1)} + \delta E_n^{(2)} + \dots \quad (1.12)$$

Le premier terme de (1.12) est l'ordre 0 de la série, le deuxième, la correction à l'ordre 1, le troisième, la correction à l'ordre 2, et ainsi de suite ...

Dans le cas où E_n est un niveau non-dégénéré de $\hat{H}_0$, nous avons

$$\delta E_n^{(1)} = \langle \phi_n | \hat{W} | \phi_n \rangle \quad (1.13)$$

$$\delta E_n^{(2)} = \sum_{p \neq n} \frac{|\langle \phi_p | \hat{W} | \phi_n \rangle|^2}{E_n - E_p} \quad (1.14)$$

1.2.2 Perturbations dépendant du temps

Formalisme général

Soit le système physique caractérisé par l'opérateur hamiltonien

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}(t) \quad (1.15)$$

où $\hat{H}_0$ est un opérateur indépendant du temps dont on connaît les fonctions propres et valeurs propres et $\hat{W}(t)$ une perturbation dépendant ou indépendante du temps. Soient E_n et $|\phi_n\rangle$ respectivement les valeurs propres et fonctions propres de $\hat{H}_0$. La théorie des perturbations dépendant du temps permet de calculer la probabilité que le système, initialement préparé dans un état propre de $\hat{H}_0$, ait évolué sous l'effet de la perturbation et soit détecté en un instant ultérieur dans un autre état propre de $\hat{H}_0$.

La théorie des perturbations dépendant du temps consiste à développer la fonction d'onde $|\psi(t)\rangle$ dans la base $|\phi_n\rangle$ des états propres de $\hat{H}_0$ selon la relation

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\phi_n\rangle \quad (1.16)$$

et à écrire les coefficients $c_n(t)$ sous la forme d'une série convergente pour tout t

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \dots = \sum_{m=0}^{\infty} c_n^{(m)}(t), \quad (1.17)$$

en manière telle qu'au final la fonction d'onde obtenue soit bien solution de l'équation de Schrödinger.

Si initialement

$$|\psi(t_0)\rangle = |\phi_i\rangle \quad (1.18)$$

alors la théorie des perturbations donne

$$c_n^{(0)}(t) = \delta_{ni} \quad (1.19)$$

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} \langle \phi_n | \hat{W}(t') | \phi_i \rangle \quad (1.20)$$

$$c_n^{(2)}(t) = \frac{-1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \sum_j e^{i\omega_{nj}t'} e^{i\omega_{ji}t''} \langle \phi_n | \hat{W}(t') | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \hat{W}(t'') | \phi_i \rangle \quad (1.21)$$

$\vdots$

$$c_n^{(m)}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^m \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{m-1}} dt_m \sum_{j_1, \dots, j_{m-1}} e^{i\omega_{nj_1}t_1} e^{i\omega_{j_1j_2}t_2} \dots e^{i\omega_{j_{m-1}i}t_m} \times \langle \phi_n | \hat{W}(t_1) | \phi_{j_1} \rangle \langle \phi_{j_1} | \hat{W}(t_2) | \phi_{j_2} \rangle \dots \langle \phi_{j_{m-1}} | \hat{W}(t_m) | \phi_i \rangle \quad (1.22)$$

où les sommes ont toujours lieu sur tous les états propres de $\hat{H}_0$ et où

$$\omega_{pq} = \frac{E_p - E_q}{\hbar} \quad (1.23)$$

Nous avons rigoureusement

$$\mathcal{P}_{if}(t) = |c_f(t)|^2 = \left| \sum_{m=0}^{\infty} c_f^{(m)}(t) \right|^2 \quad (1.24)$$

A un instant t donné, l'ordre M à partir duquel la convergence de la série devient effective est d'autant plus élevé que l'intervalle $t - t_0$ l'est aussi. Calculer la probabilité de transition à l'ordre M de la théorie des perturbations consiste à faire l'approximation

$$\mathcal{P}_{if}(t) \simeq \left| \sum_{m=0}^M c_f^{(m)}(t) \right|^2 \quad (1.25)$$

Cette approximation n'a de sens que jusqu'à un temps t donné, d'autant plus élevé que M l'est aussi.

A l'ordre 1 de la théorie des perturbations, nous avons

$$\boxed{\mathcal{P}_{if}(t) = |c_f^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t e^{i\omega_{fi}t'} \langle \phi_f | \hat{W}(t') | \phi_i \rangle dt' \right|^2} \quad (1.26)$$

Si l'élément de matrice $\langle \phi_f | \hat{W}(t) | \phi_i \rangle$ est nul, $\mathcal{P}_{if}(t) = 0$ à l'ordre 1 et le développement doit être *a minima* poussé à l'ordre 2. Nous avons dans ce cas

$$\mathcal{P}_{if}(t) = |c_f^{(2)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^4} \left| \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \sum_j e^{i\omega_{fj}t'} e^{i\omega_{ji}t''} \langle \phi_f | \hat{W}(t') | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \hat{W}(t'') | \phi_i \rangle \right|^2 \quad (1.27)$$

Le formalisme développé dans ce paragraphe et notamment les résultats (1.26) et (1.27) sont valables quelle que soit la forme de la perturbation $\hat{W}(t)$. Cette dernière peut être constante au cours du temps, en forme de « marche de trottoir » (nulle pour $t \leq t_0$, constante pour $t > t_0$), en créneau (constante dans un intervalle de temps $[t_1, t_2]$, nulle en dehors de cet intervalle), ou de toute autre forme plus compliquée.

Cas particulier d'une perturbation constante

Si $\hat{W}$ est une perturbation constante entre t_0 et t , et si nous notons le temps d'interaction² $t - t_0$ par T et $\langle \phi_f | \hat{W} | \phi_i \rangle$ par W_{fi} , nous avons à l'ordre 1

$$\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t e^{i\omega_{fi}t'} dt' \right|^2 \quad (1.28)$$

soit

$$\boxed{\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{fi}|^2 \delta_T(\omega_{fi}) T} \quad (1.29)$$

avec

$$\delta_T(\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\sin^2(\omega T/2)}{(\omega T/2)^2} T \quad (1.30)$$

La fonction $\delta_T(\omega)$ est une fonction « piquée » en 0, d'amplitude $T/2\pi\hbar$ et de largeur à mi-hauteur de l'ordre de

$$\frac{2\pi}{T} \quad (1.31)$$

En conclusion, en présence d'une perturbation constante $\hat{W}$, $\mathcal{P}_{if}(t)$ est à l'ordre 1 directement proportionnel à $|W_{fi}|^2$ et seuls les niveaux $|f\rangle$ dont l'énergie E_f est comprise dans l'intervalle

$$E_i - \frac{\pi\hbar}{T} < E_f < E_i + \frac{\pi\hbar}{T} \quad (1.32)$$

ont une probabilité non négligeable d'être peuplés à l'instant t , c'est-à-dire l'énergie de l'état final doit être identique à celle de l'état initial, à une précision $2\pi\hbar/T$. La population de tout autre niveau n'est pas affectée par la perturbation $\hat{W}$. La conservation de l'énergie est respectée au cours des processus de transition.

A l'ordre 2 de la théorie des perturbations, si $W_{if} = 0$, de même que W_{ii} et W_{ff} , nous avons

$$\boxed{\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{j \neq i, f} \frac{W_{fj} W_{ji}}{E_j - E_i} \right|^2 \delta_T(\omega_{fi}) T} \quad (1.33)$$

Encore une fois, les processus à l'ordre 2 dans ce cas nécessitent que l'énergie de l'état final soit identique à celle de l'état initial, à $2\pi\hbar/T$ près.

1.3 Approches non perturbatives

Lorsque $T \rightarrow \infty$, les probabilités (1.29) et (1.33) finissent par devenir supérieures à 1. Ce résultat est évidemment absurde et indique simplement que la théorie des perturbations cesse d'être valable lorsque T devient trop grand. Dans ce cas, des approches non perturbatives sont nécessaires pour connaître le comportement du système aux temps longs.

Dans le cas d'une perturbation constante, les processus de transition nécessitent que les énergies des états initiaux et finaux soient à peu près égales. S'il n'existe qu'un seul état $|\phi_f\rangle$ d'énergie comparable à celle de l'état $|\phi_i\rangle$ et pour lesquels l'élément de matrice W_{if} est non nul, on parle de *couplage entre 2 niveaux discrets* par la perturbation $\hat{W}$. Dans ce cas, la fonction d'onde $|\psi(t)\rangle$ n'a de coefficient $c_n(t)$ significativement non nuls dans le développement (1.16) que sur les 2 états $|\phi_i\rangle$ et $|\phi_f\rangle$. En excellente approximation, nous avons

$$|\psi(t)\rangle = c_i(t) e^{-iE_i(t-t_0)/\hbar} |\phi_i\rangle + c_f(t) e^{-iE_f(t-t_0)/\hbar} |\phi_f\rangle \quad (1.34)$$

2. ou tout simplement l'intervalle de temps après lequel on souhaite connaître l'état du système.

et le système est dit à 2 niveaux car tout se passe comme si l'hamiltonien non perturbé ne possédait effectivement que 2 niveaux d'énergie. Dans le cadre de cette approximation, la résolution analytique de l'équation de Schrödinger s'en trouve grandement facilitée. Nous allons montrer ci-dessous que la probabilité $\mathcal{P}_{if}(t)$ adopte, en fonction du temps, un comportement sinusoïdal, dont les oscillations portent le nom d'*oscillations de Rabi*.

Si au contraire, de nombreux états $|\phi_f\rangle$ faisant partie d'un quasi-continuum ont une énergie comparable à celle de l'état $|\phi_i\rangle$, le développement (1.34) de la fonction d'onde sur 2 états n'est plus correct et le comportement du système est fondamentalement différent du cas précédent. On parle de couplage entre 1 état discret et 1 continuum. Il est aussi possible d'obtenir par une méthode non perturbative une solution approchée de l'équation de Schrödinger qui soit valable en tout instant t . Il s'avère dans ce cas que le système évolue *irréversiblement* de l'état initial $|\phi_i\rangle$ vers les nombreux états $|\phi_f\rangle$. La probabilité $\mathcal{P}_{ii}(t)$ est une exponentielle décroissante dont le temps caractéristique est appelé la *durée de vie* du niveau $|\phi_i\rangle$.

1.3.1 Système à 2 niveaux - oscillations de Rabi

États propres du système

Soit un système à 2 niveaux $|a\rangle$ et $|b\rangle$, d'énergie respective E_a et E_b , caractérisé par l'hamiltonien $\hat{H}_0$. Soit une perturbation $\hat{W}$ couplant les 2 états $|a\rangle$ et $|b\rangle$, c'est-à-dire dont les éléments de matrice $W_{ab} = \langle a|\hat{W}|b\rangle$ sont non nuls. Nous supposons dans ce qui suit que $W_{aa} = W_{bb} = 0$ et que W_{ab} est réel (c'est-à-dire que $W_{ab} = W_{ba}$). Cette situation se rencontre très fréquemment dans les problèmes physiques. C'est par exemple typiquement le cas de l'interaction dipolaire électrique.

Au total, l'hamiltonien du système est donné par

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} \quad (1.35)$$

Dans la base $\{|a\rangle, |b\rangle\}$, la matrice représentant cet hamiltonien est donnée par

$$\begin{pmatrix} E_a & \hbar\Omega/2 \\ \hbar\Omega/2 & E_b \end{pmatrix} \quad (1.36)$$

avec

$$\Omega = 2 \frac{W_{ab}}{\hbar} \quad (1.37)$$

Les états et valeurs propres de l'hamiltonien $\hat{H}$ diffèrent bien entendu de ceux de $\hat{H}_0$. Nous trouvons trivialement les nouvelles valeurs de l'énergie du système

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{E_a + E_b}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(E_a - E_b)^2 + \hbar^2 \Omega^2} \\ E_2 &= \frac{E_a + E_b}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(E_a - E_b)^2 + \hbar^2 \Omega^2} \end{aligned} \quad (1.38)$$

avec les états propres correspondants

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \cos \theta |a\rangle + \sin \theta |b\rangle \\ |2\rangle &= -\sin \theta |a\rangle + \cos \theta |b\rangle \end{aligned} \quad (1.39)$$

où θ est l'angle donné par

$$\tan 2\theta = \frac{\hbar\Omega}{E_a - E_b} \quad (1.40)$$

Les relations (1.39) peuvent s'inverser pour exprimer les états $|a\rangle$ et $|b\rangle$ en fonction des nouveaux états propres $|1\rangle$ et $|2\rangle$. Nous avons

$$\begin{aligned} |a\rangle &= \cos\theta|1\rangle - \sin\theta|2\rangle \\ |b\rangle &= \sin\theta|1\rangle + \cos\theta|2\rangle \end{aligned} \quad (1.41)$$

Dynamique du système initialement dans l'état $|a\rangle$

Si le système se trouve initialement (en l'instant $t_0 = 0$) dans l'état $|a\rangle$, la perturbation $\hat{W}$ va faire évoluer le système puisque l'état $|a\rangle$ n'est plus un état propre de $\hat{H}$. En vertu de (1.4), la fonction d'onde du système s'écrit dans ce cas

$$|\psi(t)\rangle = \cos\theta e^{-iE_1 t/\hbar}|1\rangle - \sin\theta e^{-iE_2 t/\hbar}|2\rangle \quad (1.42)$$

soit, en utilisant les relations (1.39)

$$|\psi(t)\rangle = (\cos^2\theta e^{-iE_1 t/\hbar} + \sin^2\theta e^{-iE_2 t/\hbar})|a\rangle + \cos\theta \sin\theta (e^{-iE_1 t/\hbar} - e^{-iE_2 t/\hbar})|b\rangle \quad (1.43)$$

Nous pouvons mettre en évidence le terme $e^{-i(E_1+E_2)t/2\hbar}$ et ne plus en tenir compte dans la fonction d'onde puisqu'il joue dans ce cas le rôle d'un facteur de phase global. Nous obtenons alors

$$|\psi(t)\rangle = \left(\cos^2\theta e^{-i\Omega_1 t/2} + \sin^2\theta e^{i\Omega_1 t/2} \right) |a\rangle - i \sin 2\theta \sin \frac{\Omega_1 t}{2} |b\rangle \quad (1.44)$$

avec

$$\Omega_1 = \frac{E_1 - E_2}{\hbar} = \sqrt{\frac{(E_a - E_b)^2}{\hbar^2} + \Omega^2} \quad (1.45)$$

La probabilité $\mathcal{P}_{ab}(t)$ de trouver le système à l'instant t dans l'état $|b\rangle$ est donnée par

$$\mathcal{P}_{ab}(t) = |\langle b|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2 2\theta \sin^2 \frac{\Omega_1 t}{2} \quad (1.46)$$

La probabilité de transition $\mathcal{P}_{ab}(t)$ oscille au cours du temps. On parle de l'*oscillation de Rabi*, dont la pulsation Ω_1 est appelée *pulsation de Rabi* (voir figure 1.1).

Dans le cas particulier où $E_a = E_b$, on parle d'une interaction résonnante entre les 2 états par la perturbation $\hat{W}$. Nous avons $\Omega_1 = \Omega$, $\theta = \pi/4$ et

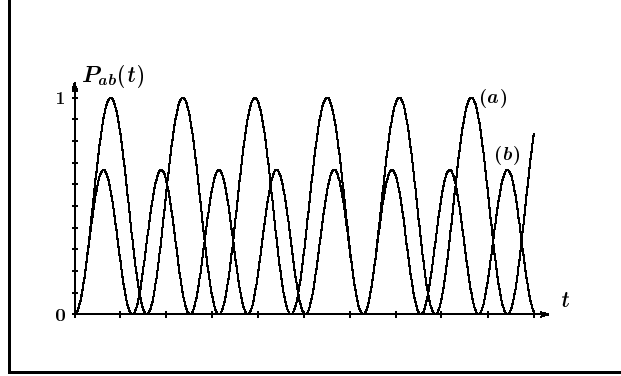
$$\mathcal{P}_{ab}(t) = \sin^2 \frac{\Omega t}{2}. \quad (1.47)$$

Dans ce cas, la probabilité de transition atteint périodiquement la valeur 1 indiquant que le système se trouve avec certitude dans l'état $|b\rangle$. Il y a transfert total de population. La pulsation de Rabi est d'autant plus importante que l'intensité du couplage W_{ab} entre les 2 niveaux est grande. La fonction d'onde (1.44) du système s'écrit ici tout simplement

$$|\psi(t)\rangle = \cos \frac{\Omega t}{2} |a\rangle - i \sin \frac{\Omega t}{2} |b\rangle \quad (1.48)$$

Si la perturbation agit pendant un temps t tel que $\Omega t = \alpha\pi$, on parle d'une impulsion $\alpha\pi$. Le tableau 1.1 résume les effets d'une impulsion $\pi/2$, π et 2π . Une impulsion $\pi/2$ place le système dans une combinaison linéaire équilibrée des états $|a\rangle$ et $|b\rangle$. Une impulsion π fait passer complètement le système de l'état $|a\rangle$ vers l'état $|b\rangle$. Une impulsion 2π ramène le système dans son état initial, à un facteur de phase global π près.

Impulsion	Effet
$\pi/2$	$ a\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(a\rangle - i b\rangle)$
π	$ a\rangle \rightarrow -i b\rangle$
2π	$ a\rangle \rightarrow - a\rangle$

TABLE 1.1 – Effet d’une impulsion $\pi/2$, π et 2π sur un système initialement dans l’état $|a\rangle$.FIGURE 1.1 – Oscillations de Rabi, (a) avec transfert total lorsque $E_a = E_b$, (b) non total sinon.

A la résonance, la théorie des perturbations dépendant du temps donne

$$\mathcal{P}_{ab}(t) = \left[\sum_{m=1,3,\dots}^{\infty} (-1)^{\frac{m-1}{2}} \frac{(\Omega t/2)^m}{m!} \right]^2. \quad (1.49)$$

Il ne s’agit ni plus ni moins que du développement en série de Taylor de la fonction sinus de l’expression exacte (1.47) de la probabilité de transition³. Seuls les ordres de perturbation impairs sont non nuls.

Dans le cas où $E_a \neq E_b$, $\theta \neq \pi/4$ et $\sin^2 2\theta < 1$. Dans ce cas $\mathcal{P}_{ab}(t)$ est toujours inférieur à 1 et le transfert de $|a\rangle$ vers $|b\rangle$ n’est jamais total, quelle que soit l’intensité du couplage entre les 2 niveaux.

Dynamique du système initialement dans l’état $|b\rangle$

Si initialement le système se trouve dans l’état $|b\rangle$, on trouve de manière analogue aux développements (1.42) à (1.44)

$$|\psi(t)\rangle = -i \sin 2\theta \sin \frac{\Omega_1 t}{2} |a\rangle + \left(\sin^2 \theta e^{-i\Omega_1 t/2} + \cos^2 \theta e^{i\Omega_1 t/2} \right) |b\rangle \quad (1.50)$$

soit, à la résonance,

$$|\psi(t)\rangle = -i \sin \frac{\Omega t}{2} |a\rangle + \cos \frac{\Omega t}{2} |b\rangle \quad (1.51)$$

3. L’obtention du développement en série de Taylor n’est pas un résultat général de la théorie des perturbations. Il s’agit juste d’un cas particulier pour le problème “simple” du système résonant à 2 niveaux.

1.3.2 Couplage entre 1 niveau discret et 1 continuum - règle d'or de Fermi

Soit un système caractérisé par l'hamiltonien indépendant du temps

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} \quad (1.52)$$

Nous supposons que le système se trouve initialement dans l'état non perturbé $|\phi_i\rangle$ d'énergie E_i et que de nombreux états non-perturbés $|\phi_n\rangle$ ont une énergie comparable à l'état initial. Ces états sont supposés faire partie d'un quasi-continuum caractérisé par une densité d'états⁴ $\rho(E)$ variant « lentement » au voisinage de $E = E_i$. Nous faisons enfin l'hypothèse que la perturbation indépendante du temps $\hat{W}$ ne couple que l'état $|\phi_i\rangle$ avec les états $|\phi_n\rangle$:

$$W_{in} = \langle \phi_i | \hat{W} | \phi_n \rangle \neq 0 \quad (1.53)$$

$$W_{ii} = \langle \phi_i | \hat{W} | \phi_i \rangle = 0 \quad (1.54)$$

$$W_{nn'} = \langle \phi_n | \hat{W} | \phi_{n'} \rangle = 0 \quad \text{pour tout } n, n' \neq i \quad (1.55)$$

L'équation de Schrödinger et la fonction d'onde du système sont projetées sur la base des états non perturbés :

$$\langle \phi_j | i\hbar \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = \langle \phi_j | \hat{H} | \psi(t) \rangle \quad \forall j \quad (1.56)$$

et

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\phi_n\rangle \quad (1.57)$$

En insérant (1.57) dans les équations (1.56), nous obtenons un ensemble d'équations différentielles auxquelles doivent satisfaire les coefficients $c_j(t)$ pour tout j , soit

$$\frac{d}{dt} c_j(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n c_n(t) e^{-i(E_n - E_j)(t-t_0)/\hbar} W_{jn}, \quad \forall j \quad (1.58)$$

Pour $j = i$ et $j = n \neq i$, nous obtenons explicitement

$$\frac{d}{dt} c_i(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_{n \neq i} c_n(t) e^{-i(E_n - E_i)(t-t_0)/\hbar} W_{in} \quad (1.59)$$

$$\frac{d}{dt} c_n(t) = \frac{1}{i\hbar} c_i(t) e^{-i(E_i - E_n)(t-t_0)/\hbar} W_{ni} \quad (1.60)$$

Sachant qu'initialement tous les coefficients $c_n(t_0)$ sont nuls pour tout $n \neq i$, l'équation (1.60) peut s'écrire sous la forme

$$c_n(t) = \frac{W_{ni}}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' c_i(t') e^{-i(E_i - E_n)(t'-t_0)/\hbar} \quad (1.61)$$

En insérant (1.61) dans l'équation (1.59), nous obtenons

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} c_i(t) &= - \sum_{n \neq i} \frac{|W_{ni}|^2}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt' c_i(t') e^{-i(E_n - E_i)(t-t')/\hbar} \\ &= - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt' c_i(t') \sum_{n \neq i} |W_{ni}|^2 e^{-i(E_n - E_i)(t-t')/\hbar} \end{aligned} \quad (1.62)$$

4. Pour un quasi-continuum d'états, on note $dN(E)$ le nombre d'états dont l'énergie est comprise entre E et $E + dE$, et on exprime ce nombre sous la forme $dN(E) = \rho(E)dE$ où $\rho(E)$ désigne ce que l'on appelle la *densité d'états*.

Quelques approximations sont ensuite réalisées. Premièrement, la somme sur les états n dans l'équation (1.62) est remplacée par une intégrale sur tous les niveaux d'énergie. En excellente approximation, nous avons

$$\sum_{n \neq i} |W_{ni}|^2 e^{-i(E_n - E_i)(t - t')/\hbar} = \int dE |W(E)|^2 \rho(E) e^{-i(E - E_i)(t - t')/\hbar} \quad (1.63)$$

si nous notons par $W(E)$ l'élément de matrice W_{ni} où n désigne l'état d'énergie E .

Deuxièmement, dans la mesure où $|W(E)|^2 \rho(E)$ varie très peu au voisinage de l'énergie $E_n = E_i$, nous avons

$$\int dE |W(E)|^2 \rho(E) e^{-i(E - E_i)(t - t')/\hbar} \simeq |W(E_i)|^2 \rho(E_i) 2\pi\hbar \delta(t - t') \quad (1.64)$$

où $\rho(E_i)$ désigne la densité d'états évaluée en $E_n = E_i$ (souvent notée de manière plus explicite $\rho(E_n = E_i)$), et $W(E_i)$ représente l'élément de matrice W_{ni} où n désigne l'état d'énergie $E_n = E_i$ (noté aussi de manière plus explicite $W(E_n = E_i)$).

En insérant ces résultats dans (1.62), nous obtenons

$$\frac{d}{dt} c_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt' c_i(t') |W(E_i)|^2 \rho(E_i) 2\pi\hbar \delta(t - t') = -\frac{\pi}{\hbar} |W(E_i)|^2 \rho(E_i) c_i(t) \quad (1.65)$$

soit

$$\frac{d}{dt} c_i(t) = -\frac{\Gamma}{2} c_i(t) \quad (1.66)$$

avec Γ donné par la *règle d'or de Fermi*⁵

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |W(E_n = E_i)|^2 \rho(E_n = E_i) \quad (1.67)$$

Le système étant supposé initialement dans l'état $|\phi_i\rangle$, nous avons $c_i(t_0) = 1$ et la solution de l'équation (1.66) est trivialement donnée par

$$c_i(t) = e^{-\Gamma(t - t_0)/2} \quad (1.68)$$

soit

$$\mathcal{P}_{ii}(t) = |c_i(t)|^2 = e^{-\Gamma(t - t_0)} = e^{-(t - t_0)/\tau} \quad (1.69)$$

avec

$$\tau = \Gamma^{-1} \quad (1.70)$$

La probabilité de trouver le système dans l'état initial *décroît exponentiellement au cours du temps* et tend vers 0 aux temps très longs. τ est appelé la *durée de vie* de l'état $|\phi_i\rangle$. Γ représente la probabilité de transition par unité de temps de l'état initial vers un quelconque autre état du continuum. En effet, cette probabilité de transition par unité de temps est donnée par la probabilité par unité de temps de trouver le système dans un état final, le système devant se trouver initialement avec certitude dans l'état $|\phi_i\rangle$. Cette probabilité est donc donnée par

$$\left. \frac{d}{dt} \sum_n \mathcal{P}_{in}(t) \right|_{t=t_0} = - \left. \frac{d\mathcal{P}_{ii}(t)}{dt} \right|_{t=t_0} = \Gamma \quad (1.71)$$

5. Si les niveaux d'énergie n sont dégénérés et dépendent d'un paramètre supplémentaire β , et si nous notons $\rho(E, \beta) dE d\beta$ le nombre d'états n dont l'énergie est comprise entre E et $E + dE$ et dont le paramètre supplémentaire est compris entre β et $\beta + d\beta$, alors l'intégrale $\int dE$ dans l'expression (1.63) doit être remplacée par l'intégrale $\int dE d\beta$. La règle d'or de Fermi devient dans ce cas $\Gamma = \int d\beta \Gamma_\beta$ avec $\Gamma_\beta = \frac{2\pi}{\hbar} |W(E_n = E_i, \beta)|^2 \rho(E_n = E_i, \beta)$.

L'état final du processus de décroissance est facilement obtenu en insérant le résultat (1.68) dans l'équation (1.61). Le calcul de l'intégral est trivial et donne

$$c_n(t) = W_{ni} \frac{1 - e^{(-\Gamma/2 + i(E_n - E_i)/\hbar)(t - t_0)}}{i\hbar\Gamma/2 + (E_n - E_i)} \quad (1.72)$$

Pour $t - t_0 \gg \Gamma^{-1}$, la probabilité de trouver le système dans un état $|\phi_n\rangle$ d'énergie E_n s'écrit

$$\mathcal{P}_{in} = \frac{|W_{ni}|^2}{\hbar^2\Gamma^2/4 + (E_n - E_i)^2} \quad (1.73)$$

et la probabilité de trouver le système dans un état d'énergie comprise entre E et $E + dE$ est donnée par

$$\begin{aligned} d\mathcal{P}(E) &= \frac{|W(E)|^2 \rho(E)}{\hbar^2\Gamma^2/4 + (E - E_i)^2} dE \\ &\simeq \frac{|W(E_i)|^2 \rho(E_i)}{\hbar^2\Gamma^2/4 + (E - E_i)^2} dE \\ &= \frac{d\mathcal{P}(E)}{dE} dE \end{aligned} \quad (1.74)$$

avec la *densité de probabilité*

$$\boxed{\frac{d\mathcal{P}(E)}{dE} = \frac{\hbar\Gamma}{2\pi} \frac{1}{\hbar^2\Gamma^2/4 + (E - E_i)^2}} \quad (1.75)$$

La distribution en énergie des états finaux atteints au cours du processus d'évolution irréversible de la fonction d'onde est une lorentzienne, centrée sur l'énergie E_i de l'état initial, et de largeur à mi-hauteur donnée par

$$\Delta E = \hbar\Gamma \quad (1.76)$$

Chapitre 2

Formulation générale des postulats de la physique quantique

La théorie quantique des systèmes physiques se base sur un ensemble de postulats que nous pouvons résumer comme suit.

Postulat 1. A tout système physique isolé est associé un espace d'Hilbert $\mathcal{H}$ défini sur le corps des complexes, appelé *espace des états du système*, dont les éléments de norme unité, appelés *vecteurs d'états*, représentent les états possibles du système.

Postulat 2. L'évolution d'un système *fermé* est descriptible par une *transformation unitaire*. L'état $|\psi\rangle$ du système à un instant t_1 est lié à son état $|\psi'\rangle$ à un instant t_2 par un opérateur unitaire $\hat{U}$ ne dépendant que de t_1 et t_2 :

$$|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle. \quad (2.1)$$

Il existe une version équivalente du second postulat qui s'exprime comme suit.

Postulat 2'. Tout système fermé est caractérisé par un opérateur *hamiltonien* $\hat{H}$ hermitique qui gouverne l'évolution temporelle de l'état du système conformément à l'équation dite *de Schrödinger*,

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle, \quad (2.2)$$

où $\hbar$ est la constante de Planck divisée par 2π .

La connexion avec le postulat 2 est évidente. Si $|\psi\rangle$ est l'état du système à un instant t_1 et $|\psi'\rangle$ son état à un instant t_2 ayant évolué conformément à l'équation de Schrödinger, alors la transformation unitaire liant ces 2 états est donnée par

$$\hat{U}(t_1, t_2) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_2-t_1)}. \quad (2.3)$$

Postulat 3. Toute opération de mesure sur un système physique (opération visant à faire interagir le système initialement fermé avec un système extérieur, typiquement un appareil de mesure, pour obtenir des informations sur l'état du système) ne peut donner qu'un ensemble déterminé de résultats et est décrite par la donnée d'un ensemble d'opérateurs $\{\hat{M}_k\}$, dits *opérateurs de mesure*, agissant dans l'espace des états du système, l'indice k se référant aux différents résultats de mesure possibles. Les opérateurs de mesure satisfont la relation de complétude

$$\sum_k \hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k = \hat{1}. \quad (2.4)$$

Si $|\psi\rangle$ est l'état du système *avant* l'opération de mesure, la probabilité d'obtenir le résultat k vaut

$$p_k = \langle \psi | \hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k | \psi \rangle, \quad (2.5)$$

et, si ce résultat a été obtenu, l'état du système juste *après* la mesure est donné par

$$|\psi_k\rangle = \frac{\hat{M}_k |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k | \psi \rangle}}. \quad (2.6)$$

La relation de complétude (2.4) exprime que la somme des probabilités p_k est égale à 1.

S'il n'est pas requis de connaître l'état du système après la mesure, la donnée de l'ensemble d'opérateurs positifs¹ $\hat{E}_k = \hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k$ vérifiant $\sum_k \hat{E}_k = \hat{1}$ est totalement suffisante pour caractériser l'opération de mesure, les probabilités d'obtention des divers résultats étant dans ce cas simplement données par

$$p_k = \langle \psi | \hat{E}_k | \psi \rangle. \quad (2.7)$$

L'ensemble des opérateurs $\hat{E}_k$ porte le nom de *POVM* (pour *Positive-Operator Valued Measure*), les $\hat{E}_k$ individuellement étant appelés *éléments POVM*.

La dénomination POVM s'entend de façon générale pour tout ensemble d'opérateurs positifs $\{\hat{E}_k\}$ vérifiant la relation de complétude $\sum_k \hat{E}_k = \hat{1}$. Tout POVM définit toujours une opération de mesure compte tenu que tout opérateur positif $\hat{E}_k$ peut toujours se décomposer en un produit $\hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k$, les opérateurs $\hat{M}_k$ satisfaisant dans ce cas aux conditions pour définir une opération de mesure.

Les *mesures projectives* ne sont qu'un cas particulier des opérations de mesure décrites très généralement avec le postulat 3. Une mesure projective consiste en la donnée d'un opérateur hermitique $\hat{A}$ agissant dans l'espace des états du système et vérifiant le théorème de décomposition spectrale

$$\hat{A} = \sum_k a_k \hat{P}_k, \quad (2.8)$$

avec a_k les valeurs propres (réelles) de $\hat{A}$ et $\hat{P}_k$ les opérateurs de projection sur les sous-espaces propres respectifs des différentes valeurs propres. Les opérateurs de projection sont hermitiques, vérifient $\hat{P}_k^2 = \hat{P}_k$ et la relation de complétude $\sum_k \hat{P}_k = \hat{1}$. Toute mesure projective est entièrement caractérisée par l'ensemble de ses opérateurs de projection $\hat{P}_k$ qui agissent en qualité d'opérateur de mesure $\hat{M}_k$: ils vérifient bien $\sum_k \hat{P}_k^\dagger \hat{P}_k = \hat{1}$ et nous avons

$$p_k = \langle \psi | \hat{P}_k | \psi \rangle \quad (2.9)$$

1. On entend par *opérateur positif [négatif]* tout opérateur hermitique *semi-défini positif [négatif]*, c'est-à-dire tout opérateur hermitique $\hat{O}$ vérifiant $\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \geq 0$ [≤ 0], pour tout état $|\psi\rangle$. La trace et les valeurs propres d'un opérateur positif [négatif] sont positives [négatives]. Pareillement, on appelle *opérateur strictement positif [négatif]* tout opérateur hermitique *défini positif [négatif]*, c'est-à-dire tout opérateur hermitique $\hat{O}$ vérifiant $\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle > 0$ [< 0], pour tout état $|\psi\rangle$. La trace et les valeurs propres d'un opérateur strictement positif [négatif] sont strictement positives [négatives].

et

$$|\psi_k\rangle = \frac{\hat{P}_k|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\hat{P}_k|\psi\rangle}}. \quad (2.10)$$

Pour une mesure projective, les éléments POVM de la mesure sont les opérateurs de projection eux-mêmes :

$$\hat{E}_k = \hat{P}_k^\dagger \hat{P}_k = \hat{P}_k. \quad (2.11)$$

Postulat 4. L'espace des états d'un système composite est le produit tensoriel des espaces des états individuels des divers constituants du système. Dans le cas d'un système composite constitué de N sous-systèmes (système dit N -partite), chacun préparé individuellement dans un état $|\psi_i\rangle$ ($i = 1, \dots, N$), l'état du système global est donné par

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle. \quad (2.12)$$

Chapitre 3

L'opérateur densité

3.1 États purs

Pour un système physique dans un état $|\psi\rangle$ (normé), on définit l'*opérateur densité*

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (3.1)$$

agissant dans l'espace des états du système. Le système est dit se trouver dans l'*état pur* $|\psi\rangle$ ou, par extension de langage, dans l'état $\hat{\rho}$. L'opérateur densité n'est autre que l'opérateur de projection sur l'état $|\psi\rangle$ ¹.

On vérifie sans peine que l'opérateur densité est un opérateur positif de trace égale à un² :

$$\hat{\rho} \geq 0 \quad (3.2)$$

et

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1. \quad (3.3)$$

En effet, comme tous les opérateurs de projection, l'opérateur densité est hermitique :

$$\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho} \quad (3.4)$$

et nous avons pour tout état $|\phi\rangle$

$$\langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = |\langle\phi|\psi\rangle|^2 \geq 0. \quad (3.5)$$

Par ailleurs, si $|i\rangle$ désigne une base de l'espace des états du système,

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = \sum_i \langle i|\hat{\rho}|i\rangle = \sum_i |\langle i|\psi\rangle|^2 = 1. \quad (3.6)$$

Nous avons également

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1. \quad (3.7)$$

En effet,

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = \sum_i \langle i|\hat{\rho}^2|i\rangle = \sum_i \langle i|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi|i\rangle = \sum_i |\langle i|\psi\rangle|^2 = 1. \quad (3.8)$$

1. L'opérateur de projection $|\psi\rangle\langle\psi|$ est l'opérateur qui, à tout état $|\phi\rangle$, associe l'état $|\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle \equiv \langle\psi|\phi\rangle|\psi\rangle$.

2. Pour rappel, la trace d'un opérateur est la somme des éléments diagonaux de la matrice représentant l'opérateur dans une représentation quelconque. La trace vérifie les propriétés suivantes : $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A})$, $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \text{Tr}(\hat{C}\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{C}\hat{A})$, $\text{Tr}(\hat{A}+\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{A})+\text{Tr}(\hat{B})$, $\text{Tr}(c\hat{A}) = c\text{Tr}(\hat{A})$, et $\text{Tr}(\hat{A}\otimes\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{A})\text{Tr}(\hat{B})$.

Pour tout opérateur $\hat{A}$, nous avons

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho}). \quad (3.9)$$

En effet, si $|i\rangle$ désigne une base de l'espace des états du système,

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle &= \sum_{i,j} \langle \psi | i \rangle \langle i | \hat{A} | j \rangle \langle j | \psi \rangle = \sum_{i,j} \langle i | \hat{A} | j \rangle \langle j | \psi \rangle \langle \psi | i \rangle \\ &= \sum_{i,j} \langle i | \hat{A} | j \rangle \langle j | \hat{\rho} | i \rangle = \sum_i \langle i | \hat{A} \hat{\rho} | i \rangle = \text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho}). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Si $|\psi'\rangle$ est relié à $|\psi\rangle$ par une transformation unitaire $\hat{U}$ ($|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$), alors les opérateurs densité correspondants vérifient

$$\hat{\rho}' = \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger. \quad (3.11)$$

Lorsque $|\psi\rangle$ évolue conformément à l'équation de Schrödinger, l'opérateur densité obéit à l'équation d'évolution

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (3.12)$$

En effet,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} &= i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle \langle \psi| = i\hbar \left[\frac{d}{dt} |\psi\rangle \langle \psi| + |\psi\rangle \langle \frac{d}{dt} \psi| + |\frac{d}{dt} \psi\rangle \langle \psi| \right] \\ &= i\hbar \left[\frac{d}{dt} |\psi\rangle \langle \psi| - |\psi\rangle \langle \frac{d}{dt} \psi| + |\frac{d}{dt} \psi\rangle \langle \psi| \right] \\ &= |\hat{H}\psi\rangle \langle \psi| - |\psi\rangle \langle \hat{H}\psi| = \hat{H} |\psi\rangle \langle \psi| - |\psi\rangle \langle \psi| \hat{H}^\dagger = \hat{H} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{H} = [\hat{H}, \hat{\rho}]. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Si, au cours d'une opération de mesure caractérisée par les opérateurs $\hat{M}_k$, l'état $|\psi\rangle$ du système est projeté sur l'état

$$|\psi_k\rangle = \frac{\hat{M}_k |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k | \psi \rangle}}, \quad (3.14)$$

alors l'opérateur densité correspondant s'exprime selon

$$\hat{\rho}_k = \frac{\hat{M}_k \hat{\rho} \hat{M}_k^\dagger}{\text{Tr}(\hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k \hat{\rho})} \quad (3.15)$$

et la probabilité d'occurrence de ce résultat vaut

$$p_k = \text{Tr}(\hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k \hat{\rho}). \quad (3.16)$$

3.2 États mixtes

Soit un système physique dont on ne sait pas exactement dans quel état il se trouve, mais pour lequel on sait néanmoins qu'il possède une probabilité p_1 d'être dans un état $|\psi_1\rangle, \dots, p_n$ d'être dans un état $|\psi_n\rangle$ avec évidemment $\sum_{j=1}^n p_j = 1$. Dans ce cas, on définit l'opérateur densité

$$\hat{\rho} = \sum_{j=1}^n p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|, \quad (3.17)$$

et le système est dit dans l'état *mixte* $\hat{\rho}$ ou dans le *mélange statistique* d'états $|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$, ou encore dans l'*ensemble d'états purs* $\{p_j, |\psi_j\rangle\}$. Un état pur n'est qu'un cas particulier d'état mixte dont le mélange statistique ne contient qu'un seul état.

L'opérateur densité est un opérateur positif de trace égale à un :

$$\hat{\rho} \geq 0 \quad (3.18)$$

et

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1. \quad (3.19)$$

En effet, l'opérateur densité est hermitique :

$$\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho} \quad (3.20)$$

et nous avons pour tout état $|\phi\rangle$

$$\langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle = \sum_j p_j \langle\phi|\psi_j\rangle \langle\psi_j|\phi\rangle = \sum_j p_j |\langle\phi|\psi_j\rangle|^2 \geq 0. \quad (3.21)$$

Par ailleurs, si $|i\rangle$ désigne une base de l'espace des états du système,

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = \sum_i \langle i|\hat{\rho}|i\rangle = \sum_{i,j} p_j |\langle i|\psi_j\rangle|^2 = \sum_j p_j = 1. \quad (3.22)$$

Inversement, tout opérateur $\hat{\rho}$ positif de trace égale à un représente un état mixte. En effet, soit λ_i et $|u_i\rangle$ les valeurs et vecteurs propres normés de l'opérateur $\hat{\rho}$. Les vecteurs propres forment une base orthonormée de l'espace des états ($\hat{\rho}$ est hermitique), les valeurs propres sont toutes positives ($\hat{\rho}$ est positif) et de somme égale à un (car la trace d'un opérateur hermitique est égale à la somme de ses valeurs propres). Nous avons

$$\hat{\rho} = \sum_i \lambda_i |u_i\rangle \langle u_i|, \quad (3.23)$$

qui traduit le fait que $\hat{\rho}$ représente un mélange statistique des états $|u_i\rangle$.

Nous avons également

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1, \quad (3.24)$$

l'égalité n'ayant lieu que pour des états purs. En effet, si $|i\rangle$ désigne une base orthonormée, nous avons

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = \sum_i \langle i|\hat{\rho}^2|i\rangle = \sum_{i,j,k} p_j p_k \langle i|\psi_j\rangle \langle\psi_j|\psi_k\rangle \langle\psi_k|i\rangle = \sum_{j,k} p_j p_k |\langle\psi_j|\psi_k\rangle|^2 \leq \sum_{j,k} p_j p_k = 1, \quad (3.25)$$

l'égalité ne pouvant avoir lieu que si la somme sur j ne contient qu'un seul élément $|\psi_j\rangle$, c'est-à-dire dans le cas pur.

Pour tout opérateur $\hat{A}$ positif [négatif], nous avons

$$\text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}) \geq 0 \text{ } [\leq 0], \quad (3.26)$$

pour tout opérateur densité $\hat{\rho}$. En effet, si $|i\rangle$ désigne une base orthonormée, nous avons pour tout opérateur densité $\hat{\rho} = \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle\psi_j|$

$$\text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}) = \sum_i \langle i|\hat{A}\hat{\rho}|i\rangle = \sum_{i,j} p_j \langle i|\hat{A}|\psi_j\rangle \langle\psi_j|i\rangle = \sum_j p_j \langle\psi_j|\hat{A}|\psi_j\rangle \geq 0 \text{ } [\leq 0]. \quad (3.27)$$

Si les états $|\psi'_j\rangle$ sont reliés aux états $|\psi_j\rangle$ par une transformation unitaire $\hat{U}$, alors les opérateurs densité correspondants vérifient

$$\hat{\rho}' = \hat{U}\hat{\rho}\hat{U}^\dagger. \quad (3.28)$$

Si les états $|\psi_j\rangle$ évoluent conformément à l'équation de Schrödinger, l'opérateur densité obéit à l'équation d'évolution

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (3.29)$$

En effet,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} = i\hbar \frac{d}{dt} \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle\psi_j| = \sum_j p_j (i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_j\rangle \langle\psi_j|) = \sum_j p_j [\hat{H}, |\psi_j\rangle \langle\psi_j|] = [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (3.30)$$

Si une opération de mesure caractérisée par les opérateurs $\hat{M}_k$ est réalisée pour un système physique dans un état $\hat{\rho}$, alors la probabilité d'occurrence du résultat k est donnée par

$$p_k = \text{Tr}(\hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k \hat{\rho}) \quad (3.31)$$

et l'état du système juste après la mesure, *si* ce résultat a été obtenu, vaut

$$\hat{\rho}_k = \frac{\hat{M}_k \hat{\rho} \hat{M}_k^\dagger}{\text{Tr}(\hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k \hat{\rho})}. \quad (3.32)$$

En effet, pour un système dans un état $\hat{\rho} = \sum_j p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$, la probabilité d'obtention du résultat k vaut $p_k = \sum_j p_j p_{k|j}$ où $p_{k|j}$ désigne la probabilité conditionnelle d'obtenir le résultat k si le système était dans l'état $|\psi_j\rangle$. Nous avons donc, si $\hat{\rho}_j$ désigne $|\psi_j\rangle\langle\psi_j|$,

$$p_k = \sum_j p_j \text{Tr}(\hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k \hat{\rho}_j) = \text{Tr}(\hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k \sum_j p_j \hat{\rho}_j) = \text{Tr}(\hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k \hat{\rho}). \quad (3.33)$$

D'autre part, si le résultat de mesure k est obtenu, alors l'état du système après la mesure est donné par le mélange d'états purs $\{p_j p_{k|j}/p_k, |\psi_{k|j}\rangle\}$ avec $|\psi_{k|j}\rangle$ l'état après la mesure qui serait obtenu si le système était avant dans l'état $|\psi_j\rangle$. En notant $|\psi_{k|j}\rangle\langle\psi_{k|j}|$ par $\hat{\rho}_{k|j}$, l'état du système après la mesure s'écrit

$$\hat{\rho}_k = \sum_j \frac{p_j p_{k|j}}{p_k} \hat{\rho}_{k|j} = \sum_j \frac{p_j p_{k|j}}{p_k} \frac{\hat{M}_k \hat{\rho}_j \hat{M}_k^\dagger}{\text{Tr}(\hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k \hat{\rho}_j)} = \frac{1}{p_k} \sum_j p_j \hat{M}_k \hat{\rho}_j \hat{M}_k^\dagger = \frac{\hat{M}_k \hat{\rho} \hat{M}_k^\dagger}{\text{Tr}(\hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k \hat{\rho})}. \quad (3.34)$$

Si une opération de mesure sur un système est réalisée sans qu'il ne soit pris connaissance du résultat de mesure, alors l'état du système après la mesure est, *avec certitude*, l'état mixte

$$\sum_k p_k \hat{\rho}_k = \sum_k \hat{M}_k \hat{\rho} \hat{M}_k^\dagger. \quad (3.35)$$

Si un système possède une probabilité p_1 d'être dans un état mixte $\hat{\rho}_1, \dots, p_j$ d'être dans un état mixte $\hat{\rho}_j, \dots$, alors le système se trouve dans l'état décrit par l'opérateur densité

$$\hat{\rho} = \sum_j p_j \hat{\rho}_j, \quad (3.36)$$

appelé l'ensemble d'états $\{p_j, \hat{\rho}_j\}$. En effet, chaque état ρ_j est un certain ensemble d'états purs $\{p_{jk}, |\psi_{jk}\rangle\}$ avec $\sum_k p_{jk} = 1$. Dans ce cas, si le système a une probabilité p_j d'être dans l'état $\hat{\rho}_j$, cela implique qu'il possède une probabilité $p_j p_{jk}$ d'être dans l'état pur $|\psi_{jk}\rangle$ et que par conséquent, l'état du système est l'opérateur densité

$$\hat{\rho} = \sum_{jk} p_j p_{jk} |\psi_{jk}\rangle\langle\psi_{jk}| = \sum_j p_j \sum_k p_{jk} |\psi_{jk}\rangle\langle\psi_{jk}| = \sum_j p_j \hat{\rho}_j. \quad (3.37)$$

3.3 La trace partielle

Soit un système composite constitué de 2 parties (un système dit *bipartite*). Soit $\mathcal{E}$ l'espace des états global et $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$ les espaces des états des 2 parties du système. Si le système est dans un état global $\hat{\rho}$, on définit les *opérateurs densités réduits* $\hat{\rho}_1 \equiv \text{Tr}_2(\hat{\rho})$ et $\hat{\rho}_2 \equiv \text{Tr}_1(\hat{\rho})$, respectivement agissant dans les espaces $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$, tels que leurs éléments dans toute base $\{|i\rangle\}$ dans leur espace respectif s'écrivent

$$\langle i | \hat{\rho}_1 | i' \rangle = \sum_k \langle i, k | \hat{\rho} | i', k \rangle, \quad (3.38)$$

$$\langle i | \hat{\rho}_2 | i' \rangle = \sum_k \langle k, i | \hat{\rho} | k, i' \rangle. \quad (3.39)$$

On vérifie sans peine que $\hat{\rho}_1$ et $\hat{\rho}_2$ définissent bien 2 opérateurs densité respectivement dans $\mathcal{E}_1$ et $\mathcal{E}_2$, c'est-à-dire qu'ils sont des opérateurs positifs de trace égale à 1.

L'intérêt des opérateurs densité réduits, également appelés *traces partielles*, réside dans ce que chaque sous-système du système global peut être vu comme s'il était dans un de ces états, *mais uniquement* pour toute opération de mesure relative au sous-système en question. Ceci résulte de ce que, pour tout opérateur hermitique $\hat{A}_i$ défini sur le seul sous-espace $\mathcal{E}_i$ ($i = 1, 2$), nous avons

$$\text{Tr}_{\mathcal{E}}(\hat{A}_i \hat{\rho}) = \text{Tr}_{\mathcal{E}_i}(\hat{A}_i \hat{\rho}_i). \quad (3.40)$$

En effet, nous avons par exemple pour le cas $i = 1$ (le cas $i = 2$ se traite de façon analogue) $\text{Tr}_{\mathcal{E}}(\hat{A}_1 \hat{\rho}) = \sum_{i,j} \langle i, j | \hat{A}_1 \hat{\rho} | i, j \rangle = \sum_{i,j,i',j'} \langle i, j | \hat{A}_1 | i', j' \rangle \langle i', j' | \hat{\rho} | i, j \rangle = \sum_{i,j,i',j'} \langle i | \hat{A}_1 | i' \rangle \langle j | j' \rangle \langle i', j' | \hat{\rho} | i, j \rangle = \sum_{i,j,i'} \langle i | \hat{A}_1 | i' \rangle \langle i', j | \hat{\rho} | i, j \rangle = \sum_{i,i'} \langle i | \hat{A}_1 | i' \rangle \langle i' | \hat{\rho}_1 | i \rangle = \sum_i \langle i | \hat{A}_1 \hat{\rho}_1 | i \rangle = \text{Tr}_{\mathcal{E}_1}(\hat{A}_1 \hat{\rho}_1)$.

Il est fondamental de noter que, de façon générale, le système global ne peut être vu comme 2 sous-systèmes qui seraient respectivement dans les états $\hat{\rho}_1$ et $\hat{\rho}_2$:

$$\hat{\rho} \neq \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2. \quad (3.41)$$

Cela peut se produire, mais pas toujours.

Lorsque le système global est dans un état séparé $\hat{\rho} = \hat{\sigma}_1 \otimes \hat{\sigma}_2$, alors $\hat{\rho}_1 = \hat{\sigma}_1$ et $\hat{\rho}_2 = \hat{\sigma}_2$. Dans ce cas, les sous-systèmes se comportent *en toute circonstance* (et plus uniquement pour toute opération de mesure les concernant directement) comme des systèmes individuels sans interaction dans les états $\hat{\sigma}_1$ et $\hat{\sigma}_2$.

Notons enfin que l'évolution temporelle des opérateurs densité réduits est dictée par des équations bien plus compliquées que l'équation de Schrödinger à laquelle obéit l'opérateur densité $\hat{\rho}$ du système global lorsque ce dernier est un système fermé.

3.4 Reformulation des postulats avec l'opérateur densité

Les postulats de la théorie quantique peuvent s'exprimer dans la formulation de l'opérateur densité. Ces postulats s'établissent comme suit.

Postulat 1. A tout système physique isolé est associé un espace d'Hilbert $\mathcal{H}$ défini sur le corps des complexes, appelé *espace des états du système*. A tout instant, l'état du système est décrit par la donnée d'un *opérateur densité* $\hat{\rho}$, opérateur positif de trace 1 agissant dans l'espace $\mathcal{H}$. Si le système est dans un état $\hat{\rho}_i$ avec une probabilité p_i , alors l'opérateur densité du système est $\sum_i p_i \hat{\rho}_i$.

Postulat 2. L'évolution d'un système *fermé* est descriptible par une *transformation unitaire*. L'état $\hat{\rho}$ du système à un instant t_1 est lié à son état $\hat{\rho}'$ à un instant t_2 par un opérateur unitaire $\hat{U}$ ne dépendant que de t_1 et t_2 :

$$\hat{\rho}' = \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger. \quad (3.42)$$

Postulat 2'. Tout système fermé est caractérisé par un opérateur *hamiltonien* $\hat{H}$ hermitique qui gouverne l'évolution temporelle de l'état du système conformément à l'équation dite *de Schrödinger*,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (3.43)$$

où $\hbar$ est la constante de Planck divisée par 2π .

Postulat 3. Toute opération de mesure sur un système physique ne peut donner qu'un ensemble déterminé de résultats et est décrite par la donnée d'un ensemble d'opérateurs $\{\hat{M}_k\}$, dits *opérateurs de mesure*, agissant dans l'espace des états du système, l'indice k se référant aux différents résultats de mesure possibles. Les opérateurs de mesure satisfont la relation de complétude

$$\sum_k \hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k = \hat{1}. \quad (3.44)$$

Si $\hat{\rho}$ est l'état du système *avant* l'opération de mesure, la probabilité d'obtenir le résultat k vaut

$$p_k = \text{Tr}(\hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k \hat{\rho}), \quad (3.45)$$

et, *si* ce résultat a été obtenu, l'état du système juste *après* la mesure est donné par

$$\hat{\rho}_k = \frac{\hat{M}_k \hat{\rho} \hat{M}_k^\dagger}{\text{Tr}(\hat{M}_k^\dagger \hat{M}_k \hat{\rho})}. \quad (3.46)$$

Postulat 4. L'espace des états d'un système composite est le produit tensoriel des espaces des états individuels des divers constituants du système. Dans le cas d'un système composite constitué de N sous-systèmes, chacun préparé individuellement dans un état $\hat{\rho}_i$ ($i = 1, \dots, N$), l'état du système global est donné par

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \dots \otimes \hat{\rho}_N. \quad (3.47)$$

Bibliographie

- [1] A. Acín, E. Jané, W. Dür, and G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **85**, 4811 (2000).
- [2] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press (2000).
- [3] C. H. Bennett *et al.*, Phys. Rev. A **59**, 1070 (1999).
- [4] C. H. Bennett, S. Popescu, D. Rohrlich, J. A. Smolin, and A. V. Thapliyal, Phys. Rev. A **63**, 012307 (2000).
- [5] W. Dür, G. Vidal, and J. I. Cirac, Phys. Rev. A **62**, 062314 (2000).
- [6] M. Horodecki, Quant. Inform. Comput. **1**, 3 (2001).
- [7] W. K. Wootters, Phys. Rev. Lett. **80**, 2245 (1998).
- [8] M. Plenio, Phys. Rev. Lett. **95**, 090503 (2005).
- [9] G. Vidal, J. Mod. Opt. **47**, 355 (2000).
- [10] C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin, and W. K. Wootters, Phys. Rev. A **54**, 3824 (1996).