Université Joseph Fourier. Master 1 Physique
TD de mécanique quantique, Frédéric Faure.

Solutions TD n°12
Modèle simple de décohérence induit par l'environement. Mécanique quantique statistique.

---

1 Interférence de Young avec des spins 1/2

1. L'état initial est $|+\rangle$ qui se décompose dans les branches A,B en la superposition :

$$|+_z\rangle = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}|+_x\rangle}_{A} + \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}|-_x\rangle}_{B}$$

(voir chapitre 4 du cours). Au point R il se recombine en l'état $|+_z\rangle$. Aux points D, E il se décompose en

$$|+_z\rangle = \underbrace{|+_z\rangle}_{D} + \underbrace{0}_{E}$$

Donc $P_D = 1$ et $P_E = 0$.

2. Si il y a un absorbeur en A, alors la composante selon A est détruite, et après le passage de l'absorbeur l'état est

$$\underbrace{0}_{A} + \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}|-_x\rangle}_{B} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}|-_x\rangle}_{R}$$

D'après la formule $|-_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_z\rangle - |-_z\rangle)$ (voir chap 4 du cours) au déduit que aux points D, E l'état est dans la superposition :

$$\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}|-_x\rangle}_{R} = \underbrace{\frac{1}{2}|+_z\rangle}_{D} - \underbrace{\frac{1}{2}|-_z\rangle}_{E}$$

et donc

$$P_D = \frac{\left|\frac{1}{2}\right|^2}{\left|\frac{1}{2}\right|^2 + \left|\frac{1}{2}\right|^2} = \frac{1}{2}, \quad P_E = \frac{\left|-\frac{1}{2}\right|^2}{\left|\frac{1}{2}\right|^2 + \left|\frac{1}{2}\right|^2} = \frac{1}{2},$$

Interprétation : à la question 1 on peut interpréter le résultat $P_E = 0$ comme une interférence "destructrice", et $P_D = 1$ comme une interférence "constructive". et la question 2 montre que si l'on détecte la particule dans le chemin A ou B, ces interférences disparaissent, il apparait une équiprobabilité $P_D = P_E = \frac{1}{2}$. (C'est comme un système de fente de Young mais avec 2 points).

3.

(a) Au point I, la particule est isolée de son environement, ils sont dans un état produit (non enchevetré) :

$$\psi_{avant} = |+_z\rangle \otimes |E\rangle$$

On utilise la décomposition $|+_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+_x\rangle + |-_x\rangle\right)$ pour écrire le même état décomposé avant le passage aux points A, B :

$$\psi_{avant} = \left(\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}|+_x\rangle}_{A} + \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}|-_x\rangle}_{B}\right) \otimes |E\rangle$$

A près le passage (emmission d'un photon) il devient

$$\psi_{apres} = \left(\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}|+_x\rangle \otimes |E_A\rangle}_{A} + \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}|-_x\rangle \otimes |E_B\rangle}_{B}\right)$$

Dans cette écriture, on observe que ψ_{apres} n'est pas un état produit, mais c'est un état enchevétré ou corrélé : la particule en A (état $|+_x\rangle$) est corrélée à l'état $|E_A\rangle$ de l'environement. La particule en B (état $|-_x\rangle$) est corrélée à l'état $|E_B\rangle$ de l'environement. Au point R, cela ne change pas, et au point D, E on utilise la décomposition : $|\pm_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+_z\rangle \pm |-_z\rangle\right)$ pour écrire

$$\begin{aligned}\psi_{apres} &= \left(\underbrace{\frac{1}{2}\left(|+_z\rangle + |-_z\rangle\right) \otimes |E_A\rangle}_{A} + \underbrace{\frac{1}{2}\left(|+_z\rangle - |-_z\rangle\right) \otimes |E_B\rangle}_{B}\right)\\ &= \left(\underbrace{\frac{1}{2}|+_z\rangle \otimes \left(|E_A\rangle + |E_B\rangle\right)}_{D} + \underbrace{\frac{1}{2}|-_z\rangle \otimes \left(|E_A\rangle - |E_B\rangle\right)}_{E}\right)\end{aligned}$$

(b) Dans la base $|\pm_z\rangle$, d'après les expressions ci-dessus, la matrice densité totale est

$$\rho_{avant} = |\psi_{avant}\rangle\langle\psi_{avant}| = \left(|+_z\rangle \otimes |E\rangle\right) \otimes \left(\langle +_z| \otimes \langle E|\right) = \left(|+_z\rangle\langle +_z|\right) \otimes \left(|E\rangle\langle E|\right)$$

et donc (on rappel que en algèbre linéaire $\mathrm{Tr}\left(|a\rangle\langle b|\right) = \langle a|b\rangle$), ici $\mathrm{Tr}\left(|E\rangle\langle E|\right) = \langle E|E\rangle = 1$,

$$\tilde{\rho}_{avant} = \mathrm{Tr}_{env}\left(\rho_{avant}\right) = \left(|+_z\rangle\langle +_z|\right) \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

C'est un état pur. De même

$$
\begin{aligned}
\rho_{apres} &= |\psi_{apres}\rangle\langle\psi_{apres}| \\
&= \left(\underbrace{\frac{1}{2}|+_z\rangle \otimes (|E_A\rangle + |E_B\rangle)}_{D} + \underbrace{\frac{1}{2}|-_z\rangle \otimes (|E_A\rangle - |E_B\rangle)}_{E}\right) \\
&\otimes \left(\underbrace{\frac{1}{2}\langle+_z| \otimes (\langle E_A| + \langle E_B|)}_{D} + \underbrace{\frac{1}{2}\langle-_z| \otimes (\langle E_A| - \langle E_B|)}_{E}\right)
\end{aligned}
$$

et donc

$$
\begin{aligned}
\tilde{\rho}_{apres} \equiv \frac{1}{4} &\begin{pmatrix} \mathrm{Tr}_{env}\left(|E_A\rangle + |E_B\rangle\right) \otimes (\langle E_A| + \langle E_B|) & \mathrm{Tr}_{env}\left(|E_A\rangle + |E_B\rangle\right)(|E_A\rangle - |E_B\rangle) \\ \mathrm{Tr}_{env}\left(|E_A\rangle - |E_B\rangle\right) \otimes (|E_A\rangle + |E_B\rangle) & \mathrm{Tr}_{env}\left(|E_A\rangle - |E_B\rangle\right) \otimes (|E_A\rangle - |E_B\rangle) \end{pmatrix} \\
= \frac{1}{4} &\begin{pmatrix} 1 + 1 + \langle E_A|E_B\rangle + \langle E_B|E_A\rangle & 1 - 1 - \langle E_A|E_B\rangle + \langle E_B|E_A\rangle \\ 1 - 1 + \langle E_A|E_B\rangle - \langle E_B|E_B\rangle & 1 + 1 - \langle E_A|E_B\rangle - \langle E_B|E_A\rangle \end{pmatrix} \\
= \frac{1}{2} &\begin{pmatrix} 1 + \mathrm{Re}\langle E_A|E_B\rangle & -i\mathrm{Im}\langle E_A|E_B\rangle \\ i\mathrm{Im}\langle E_A|E_B\rangle & 1 - \mathrm{Re}\langle E_A|E_B\rangle \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

(c) On déduit que (d'après la formule générale du cours $p(a_j) = \mathrm{Tr}(\mathcal{P}_j\hat{\rho})$)

$$
P_D = \mathrm{Tr}\left((|+_z\rangle\langle+_z|)\,\tilde{\rho}_{apres}\right) = \langle+_z|\tilde{\rho}_{apres}|+_z\rangle = \frac{1}{2}\left(1 + \mathrm{Re}\langle E_A|E_B\rangle\right),
$$

$$
P_E = \langle-_z|\tilde{\rho}_{apres}|-_z\rangle = \frac{1}{2}\left(1 - \mathrm{Re}\langle E_A|E_B\rangle\right)
$$

i. Dans le cas $\langle E_A|E_B\rangle = 1$ cela signifie que $|E_A\rangle = |E_B\rangle$ (car ils sont normalisés), et donc que l'environement n'a pas été influencé par la particule. Cela donne $P_D = 1$ et $P_E = 0$ comme à la question 1. Il y a des "interférences" en C, D. La matrice densité réduite est

$$
\tilde{\rho}_{apres} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}
$$

Son entropie est $S(\tilde{\rho}_{apres}) = 0$. Au point R le faisceau est polarisé selon z, car sa polarisation $\vec{P}$ définie par $\tilde{\rho}_{apres} = \frac{1}{2}\left(\mathrm{Id} + \vec{P}.\hat{\vec{\sigma}}\right)$ est $\vec{P} = (0,0,1)$.

ii. Par contre dans le cas $\langle E_A|E_B\rangle = 0$, les états $|E_A\rangle$et $|E_B\rangle$ sont différents (car orthogonaux), et on obtient $P_D = P_E = 1/2$. Dans ce dernier cas il y a "destructions des interférences" en D, E comme à la question 2. L'interprétation est ici que l'environement s'est corrélé au passage de la particule dans les chemins A ou B. Il possède cette information comme un détecteur, et cela a pour effet de détruire les interférences. La matrice densité réduite est

$$
\tilde{\rho}_{apres} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}
$$

Son entropie est $S(\tilde{\rho}_{apres}) = \log 2 \simeq 0.7 > 0$. Au point R le faisceau est non polarisé, car sa polarisation $\vec{P}$ définie par $\tilde{\rho}_{apres} = \frac{1}{2}\left(\mathrm{Id} + \vec{P}.\hat{\vec{\sigma}}\right)$ est $\vec{P} = (0,0,0)$.

2 Modèle simple de décohérence

1. Du fait que $|\pm\rangle$ sont vecteurs propres de $\hat{S}_z$, on a [1]

$$
\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle = e^{-it\hat{H}}|\psi(0)\rangle &= e^{-it\hat{S}_z\otimes\hat{H}_e}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle\otimes|E(0)\rangle+|-\rangle\otimes|E(0)\rangle\right)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle\otimes e^{-it\frac{1}{2}\hat{H}_e}|E(0)\rangle+|-\rangle\otimes e^{+it\frac{1}{2}\hat{H}_e}|E(0)\rangle\right)
\end{aligned}
$$

Alors

$$
\begin{aligned}
\rho(t) = \frac{1}{2}&\left(|+\rangle\otimes e^{-it\frac{1}{2}\hat{H}_e}|E(0)\rangle+|-\rangle\otimes e^{+it\frac{1}{2}\hat{H}_e}|E(0)\rangle\right)\\
&\otimes\left(\langle+|\otimes\langle E(0)|e^{+it\frac{1}{2}\hat{H}_e}+\langle-|\otimes\langle E(0)|e^{-it\frac{1}{2}\hat{H}_e}\right)
\end{aligned}
$$

et (on rappel que en algèbre linéaire $\mathrm{Tr}(|a\rangle\langle b|)=\langle a|b\rangle$),

$$
\begin{aligned}
\tilde{\rho}(t) = \mathrm{Tr}_{env}(\rho(t)) &= \frac{1}{2}\Big(|+\rangle\langle+|.\langle E(0)|e^{+it\frac{1}{2}\hat{H}_e}e^{-it\frac{1}{2}\hat{H}_e}|E(0)\rangle+|+\rangle\langle-|.\langle E(0)|e^{-it\frac{1}{2}\hat{H}_e}e^{-it\frac{1}{2}\hat{H}_e}|E(0)\rangle\\
&\quad+|-\rangle\langle+|.\langle E(0)|e^{+it\frac{1}{2}\hat{H}_e}e^{+it\frac{1}{2}\hat{H}_e}|E(0)\rangle+|-\rangle\langle-|.\langle E(0)|e^{-it\frac{1}{2}\hat{H}_e}e^{+it\frac{1}{2}\hat{H}_e}|E(0)\rangle\Big)\\
&= \frac{1}{2}\Big(|+\rangle\langle+|.\langle E(0)|E(0)\rangle+|+\rangle\langle-|.\langle E(0)|e^{-it\hat{H}_e}|E(0)\rangle\\
&\quad+|-\rangle\langle+|.\langle E(0)|e^{+it\hat{H}_e}|E(0)\rangle+|-\rangle\langle-|.\langle E(0)|E(0)\rangle\Big)\\
&\equiv \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \langle E(0)|E(t)\rangle \\ \overline{\langle E(0)|E(t)\rangle} & 1\end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

2. On calcule

$$
\begin{aligned}
\langle E(0)|e^{-it\hat{H}_e}|E(0)\rangle &= \prod_{i=1}^{N}\langle e(0)|e^{-i\frac{t}{\sqrt{N}}\hat{H}}|e(0)\rangle\\
&= \left(\langle e(0)|e^{-i\frac{t}{\sqrt{N}}\hat{H}}|e(0)\rangle\right)^N
\end{aligned}
$$

A t fixé et $N\to\infty$, on a $\frac{t}{\sqrt{N}}\to 0$, or $e^x = 1+x+\frac{1}{2}x^2+o\left(x^2\right)$ donc

$$
\begin{aligned}
\langle e(0)|e^{-i\frac{t}{\sqrt{N}}\hat{H}}|e(0)\rangle &= \langle e(0)|\left(1-i\frac{t}{\sqrt{N}}\hat{H}-\frac{t^2}{2N}\hat{H}^2+\dots\right)|e(0)\rangle\\
&= \langle e(0)|e(0)\rangle - i\frac{t}{\sqrt{N}}\langle e(0)|\hat{H}|e(0)\rangle-\frac{t^2}{2N}\langle e(0)|\hat{H}^2|e(0)\rangle+o\left(\frac{t^2}{N}\right)
\end{aligned}
$$

Or $\langle e(0)|\hat{H}|e(0)\rangle = 0$ et $\sigma^2 := \langle e(0)|\hat{H}^2|e(0)\rangle$. Donc

$$
\langle e(0)|e^{-i\frac{t}{\sqrt{N}}\hat{H}}|e(0)\rangle = 1-\frac{t^2}{2N}\sigma^2+o\left(\frac{t^2}{N}\right)
$$

1. Justification de la 2eme ligne : en général $\left(\hat{A}\otimes\hat{B}\right)(|a\rangle\otimes|b\rangle) = \left(\hat{A}|a\rangle\right)\otimes\left(\hat{B}|b\rangle\right)$. Et $e^{\hat{A}\otimes\hat{B}} = \sum_{n\geq 0}\frac{1}{n!}\left(\hat{A}\otimes\hat{B}\right)^n$. Donc $e^{\hat{A}\otimes\hat{B}}(|a\rangle\otimes|b\rangle) = \sum_{n\geq 0}\frac{1}{n!}\hat{A}^n|a\rangle\otimes\hat{B}^n|b\rangle$ n'est pas un état produit en général, mais si $\hat{A}|a\rangle = \alpha|a\rangle$ (vecteur propre) alors $e^{\hat{A}\otimes\hat{B}}(|a\rangle\otimes|b\rangle) = \sum_{n\geq 0}\frac{1}{n!}\alpha^n|a\rangle\otimes\hat{B}^n|b\rangle = |a\rangle\otimes\sum_{n\geq 0}\frac{1}{n!}\left(\alpha\hat{B}\right)^n|b\rangle = |a\rangle\otimes\left(e^{\alpha\hat{B}}|b\rangle\right)$.

$$\begin{aligned}\langle E(0)|e^{-it\hat{H}_e}|E(0)\rangle &= \left(1-\frac{t^2}{2N}\sigma^2+o\left(\frac{t^2}{N}\right)\right)^N \\ &= \exp\left(N\log\left(1-\frac{t^2}{2N}\sigma^2+o\left(\frac{t^2}{N}\right)\right)\right)\end{aligned}$$

or $\log(1+x)=x+o(x)$ donc

$$\begin{aligned}\langle E(0)|e^{-it\hat{H}_e}|E(0)\rangle &= \exp\left(-N\left(\frac{t^2}{2N}\sigma^2+o\left(\frac{t^2}{N}\right)\right)\right) \\ &= \exp\left(-\frac{t^2}{2}\sigma^2(1+o(1))\right)\end{aligned}$$

Par conséquent d'après la question 1

$$\tilde{\rho}(t)=\mathrm{Tr}_{env}(\rho(t)) \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & e^{-t^2\sigma^2/2} \\ e^{-t^2\sigma^2/2} & 1\end{pmatrix}$$

Ainsi pour $t\to\infty$ $\tilde{\rho}(t)$ converge vers $\frac{1}{2}\mathrm{Id}$.

3. La base $|\pm'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm |-\rangle)$ s'obtient par la matrice de passage unitaire $P = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1\end{pmatrix} = P^{-1}$, et dans cette nouvelle base on a donc

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}(t) &\equiv P^{-1}.\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & e^{-t^2\sigma^2/2} \\ e^{-t^2\sigma^2/2} & 1\end{pmatrix}.P \\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+e^{-t^2\sigma^2/2} & 0 \\ 0 & 1-e^{-t^2\sigma^2/2}\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{1}$$

C'est une matrice diagonale donc plus facile à interpréter. On vérifie que l'état initial est un état pur :

$$\tilde{\rho}(t)\equiv\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

et l'état final pour $t\to\infty$ est totalement mélangé :

$$\tilde{\rho}(\infty)\equiv\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2\end{pmatrix}$$

Remarquons que la base notée ici $|\pm\rangle$ est la base dans laquelle s'effectue l'interaction avec l'environnement. Dans l'exercice 1, c'était la base associée à la décomposition du faisceau en A,B, donc $|\pm_x\rangle$. Et la base ici $|\pm'\rangle$ était la base $|\pm_z\rangle$ du faisceau initial et de la mesure final.

4. D'après l'expression obtenue, (1), les valeurs propres de $\tilde{\rho}(t)$ sont

$$\rho_\pm = \frac{1}{2}\left(1\pm e^{-t^2\sigma^2/2}\right)$$

L'entropie est donc

$$S(\tilde{\rho}(t)) = -\rho_+\log\rho_+ - \rho_-\log\rho_-$$

Pour $t \to \infty$, on pose $x = e^{-t^2\sigma^2/2} \ll 1$. On a

$$\begin{aligned}
S(\tilde{\rho}(t)) &= -\frac{1}{2}(1+x)\left(\log\frac{1}{2} + \log(1+x)\right) - \frac{1}{2}(1-x)\left(\log\frac{1}{2} + \log(1-x)\right) \\
&= -\frac{1}{2}(1+x)\left(-\log 2 + x - \frac{1}{2}x^2\right) - \frac{1}{2}(1-x)\left(-\log 2 - x - \frac{1}{2}x^2 + O\left(x^3\right)\right) \\
&= \log 2 - \frac{1}{2}x^2 + O\left(x^3\right) \\
&= \log 2 - \frac{1}{2}e^{-t^2\sigma^2} + O\left(e^{-3t^2\sigma^2/2}\right)
\end{aligned}$$

et pour $t \to 0^+$, $\rho_+(t) \simeq 1 - \frac{1}{4}t^2\sigma^2$, $\rho_-(t) \simeq \frac{1}{4}\sigma^2 t^2$ donc on pose $x = \frac{1}{4}\sigma^2 t^2 \ll 1$,

$$\begin{aligned}
S(\tilde{\rho}(t)) &= -(1-x)\log(1-x) - x\log x \\
&= -(1-x)\left(-x + O\left(x^2\right)\right) - x\log x \\
&= -x\log x + x + O\left(x^2\right) \\
&\simeq \frac{\sigma^2}{2}t^2\log\left(\frac{1}{t}\right) + O\left(t^2\right)
\end{aligned}$$

(Remarque peu importante : il peut paraitre surprenant d'écrire $\log\left(\frac{1}{t}\right)$ car $1/t$ n'est pas sans dimension ("cela est contraire aux préceptes de la faculté"). Mais c'est bien correct car ce terme est le terme dominant d'un développement asymptotique. Le choix de l'unité (ou le temps caractéristique) apparait dans le terme sous dominant : $\log(1/(t/\tau)) = \log(1/t) + \log\tau \simeq \log(1/t)$ pour $t \to 0$.)
D'après (1) et la définition $\tilde{\rho}(t) = \frac{1}{2}\left(\mathrm{Id} + \vec{P}(t).\hat{\vec{\sigma}}\right)$, on déduit que dans la base $|\pm'\rangle$, le vecteur de polarisation est

$$\vec{P} = \left(0, 0, e^{-t^2\sigma^2/2}\right)$$

donc $P_z(t) = e^{-t^2\sigma^2/2}$ décroit vers 0 avec le temps caractéristique de décohérence

$$\tau_{decoh.} = \frac{1}{\sigma}$$

5. Si $\rho(0) = (|S(0)\rangle\langle S(0)|) \otimes \rho_{env}$ alors on pose $\mathrm{Tr}\left(\hat{H}^2\rho_e\right) = \sigma^2$ et on obtient les même résultats.

3 Entropie d'une distribution de Boltzmann

1. On écrit

$$1 = \sum_i p_i = \frac{1}{Z}\sum_{i\geq 0} e^{-\beta i}$$

Donc (on a une série géométrique)

$$Z = \sum_{i\geq 0} e^{-\beta i} = \frac{1}{\left(1 - e^{-\beta}\right)}$$

2. D'après la définition de l'entropie

$$\begin{aligned}
S &= -\sum_i p_i \log p_i \\
&= -\frac{1}{Z}\sum_i e^{-\beta i}\left(-\log Z - \beta i\right) \\
&= \frac{1}{Z}\left(\log Z \sum_i e^{-\beta i} + \beta \sum_i e^{-\beta i} i\right) \\
&= \frac{1}{Z}\left(\left(\log Z\right) Z + \beta \sum_i e^{-\beta i} i\right)
\end{aligned}$$

Or

$$\frac{dZ}{d\beta} = -\sum_i i e^{-\beta i} = \frac{-e^{-\beta}}{\left(1-e^{-\beta}\right)^2} = -e^{-\beta} Z$$

donc

$$S = \log Z + Z\beta e^{-\beta}$$

3. Pour $\beta \to 0$ (haute température) on a

$$S = \log\left(1/\beta\right) + 1 - \beta + O\left(\beta^2\right)$$

donc l'entropie augmente comme $\log\left(1/\beta\right) = \log\left(kT\right)$.

4. Pour $\beta \to \infty$,

$$\begin{aligned}
Z &\simeq 1 + e^{-\beta} \\
\log Z &\simeq e^{-\beta} \\
S \simeq \beta e^{-\beta} &= \frac{1}{kT} e^{-\frac{1}{kT}}
\end{aligned}$$

l'entropie tend très vite vers 0. (Cela est à cause des valeurs discretes de i).