

Chapitre 9

Statistiques quantiques et décohérence

Ce chapitre est une introduction aux notions de physique quantique statistique et aux processus de décohérence. Ces notions sont essentielles pour décrire les systèmes physiques complexes et en particulier pour aborder la physique statistique. Ce formalisme est aussi à la base des théories récentes qui décrivent la décohérence, c'est à dire "apparance classique du monde" à partir des phénomènes quantique (interaction et couplage avec l'environnement).

9.1 Description d'un ensemble statistique d'états quantiques par un opérateur densité

9.1.1 Définition de l'opérateur densité

Probabilité et hasard en mécanique classique : A priori, en mécanique classique, un système peut être en principe totalement connu et si il est régi par des lois déterministes, on connaît son passé et son futur parfaitement. Par exemple l'état d'une particule est spécifiée par sa position et son impulsion (\vec{x}, \vec{p}) .

Cependant, **à cause des phénomènes de chaos déterministe** (sensibilité aux conditions initiales), cette connaissance parfaite est illusoire et impossible. On montre que le "chaos" est comme une "source de hasard". Une description probabiliste du système devient indispensable même pour un système à peu de degrés de libertés (voir cours de licence, mécanique analytique). Dans le cas le plus simple on pourra considérer des états de la particule (\vec{x}_i, \vec{p}_i) ayant chacun une probabilité P_i , avec $\sum_i P_i = 1$, ou mieux, utiliser une distribution de probabilité $P(\vec{x}, \vec{p}) dx dp$ sur l'espace de phase pour décrire de façon probabiliste l'état de la particule. On appelle cela un ensemble statistique d'états classiques.

A fortiori pour un système physique composé d'un grand nombre de particules, la description probabiliste devient indispensable, d'autant plus que des phénomènes d'ensemble (dit collectifs) apparaissent et ne s'expliquent que dans la description probabiliste. C'est la théorie de la "physique statistique classique", expliquant les phénomènes de transition de phase, etc.

Probabilité et hasard en mécanique quantique : En mécanique quantique, il y a une autre source de hasard, qui est un hasard qui apparaît lorsque un système quantique interagit avec son environnement. Dans l'état des connaissances actuel ce hasard n'est pas le fruit de mécanismes sous jacents connus, on le considère comme un "hasard spontané".

Rappelons :

Affirmation 9.1.1. "le postulat de la mesure" : une particule quantique se décrit par un vecteur $\psi \in \mathcal{H}$ dans un espace quantique. Si \hat{A} est un opérateur (autoadjoint) associé à une mesure (observable), dont le spectre est $(a_j)_j$, alors la mesure de la grandeur A sur l'état ψ donnera le résultat a_j avec la probabilité¹

$$p_\psi(a_j) = \frac{\|\mathcal{P}_j\psi\|^2}{\|\psi\|^2} = \frac{\langle\psi|\mathcal{P}_j\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

où \mathcal{P}_j est le projecteur spectral sur l'espace propre de la valeur propre a_j . De plus, si la valeur observée est a_j , alors après la mesure, l'état quantique est décrit par $\mathcal{P}_j\psi$ (le passage $\psi \rightarrow \mathcal{P}_j\psi$ s'appelle le **collapse** ou **réduction de l'état quantique**).

On peut reformuler ce postulat de la façon suivante :

Affirmation 9.1.2. "Postulat de la mesure" : après la mesure, le système quantique ψ est décrit par la superposition statistique des états $\mathcal{P}_j\psi$ chacun ayant la probabilité $p_\psi(a_j) = \frac{\|\mathcal{P}_j\psi\|^2}{\|\psi\|^2} = \frac{\langle\psi|\mathcal{P}_j\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$.

Insistons sur le fait que "ces probabilités $p_\psi(a_j)$ pour toutes les observables possibles \hat{A} caractérisent le système physique" au sens où ce sont les seules valeurs accessibles à l'expérience que l'on peut confronter à la théorie. Par exemple, on peut déduire la valeur moyenne de l'observable A est²

$$\langle A \rangle_\psi := \sum_j p_\psi(a_j) \cdot a_j = \frac{\langle\psi|\hat{A}\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

1.

Démonstration. Rappelons la preuve de la dernière égalité, utilisant que \mathcal{P}_j est un projecteur orthogonal, donc que $\mathcal{P}_j^\dagger = \mathcal{P}_j$ et $\mathcal{P}_j^2 = \mathcal{P}_j$:

$$p_\psi(a_j) = \frac{\|\mathcal{P}_j\psi\|^2}{\|\psi\|^2} = \frac{\langle\mathcal{P}_j\psi|\mathcal{P}_j\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\langle\psi|\mathcal{P}_j^\dagger\mathcal{P}_j\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\langle\psi|\mathcal{P}_j^2\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\langle\psi|\mathcal{P}_j\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

□

2. rappelons la preuve de la dernière égalité : $\sum_j p_\psi(a_j) \cdot a_j = \sum_j \frac{\langle\psi|\mathcal{P}_j\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \cdot a_j = \sum_j \frac{\langle\psi|a_j\mathcal{P}_j\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\langle\psi|\hat{A}\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$
car $\hat{A} = \sum_j a_j \mathcal{P}_j$.

9.1. DESCRIPTION D'UN ENSEMBLE STATISTIQUE D'ÉTATS QUANTIQUES PAR UN OPÉRATEUR

Ce que l'on veut rajouter dans ce chapitre est qu'il peut aussi y avoir du hasard qui se rajoute, dû à la méconnaissance du système physique. Au lieu d'un unique état quantique $\psi \in \mathcal{H}$, on voudrait donc pouvoir considérer un **ensemble statistique d'états** $\psi_i \in \mathcal{H}$, $i = 1, 2, \dots$ avec des probabilités respectives p_i , vérifiant $\sum_i p_i = 1$. D'après le postulat de la mesure ci-dessus, après une mesure de l'observable \hat{A} on aura donc le résultat a_j avec la probabilité :

$$p(a_j) = \sum_i p_i \cdot p_{\psi_i}(a_j)$$

Rappelons encore (car c'est fondamental) que la connaissance des probabilités $p(a_j)$ pour toutes les observables \hat{A} caractérise le système physique. Par exemple on déduit la valeur moyenne de A par :

$$\langle A \rangle = \sum_i p(a_j) a_j = \sum_i p_i \frac{\langle \psi_i | \hat{A} \psi_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle}$$

Cette présence de deux sources de probabilité est mal commode et la définition suivante va permettre de simplifier le formalisme (en gardant l'essentiel).

Définition 9.1.3. Pour un ensemble statistique d'état $\psi_i \in \mathcal{H}$, $i = 1, 2, \dots$ avec des probabilités respectives p_i , l'**opérateur densité** associé est

$$\hat{\rho} := \sum_i p_i \mathcal{P}_{\psi_i}, \quad \mathcal{P}_{\psi_i} := \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle} \quad (9.1.1)$$

(aussi appelé **matrice densité** ou **état quantique**), où \mathcal{P}_{ψ_i} est le projecteur orthogonal de rang 1 sur l'état ψ_i .

Dans le particulier d'un seul état ψ , on a $\hat{\rho} = \mathcal{P}_{\psi}$, on dit que c'est un **état pur**.

La propriété suivante montre que l'on peut exprimer les probabilités $p(a_j)$ à partir de l'opérateur densité $\hat{\rho}$.

Proposition 9.1.4. L'opérateur densité $\hat{\rho}$ caractérise uniquement le système physique : pour toute observable \hat{A} , la probabilité d'observer la valeur propre a_j est donnée par :

$$p(a_j) = \text{Tr}(\hat{\rho} \mathcal{P}_j) \quad (9.1.2)$$

où \mathcal{P}_j est le projecteur spectral de \hat{A} (défini plus haut). En particulier la valeur moyenne est

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A})$$

Inversement la connaissance des probabilités $p(a_j)$ pour toute observable \hat{A} détermine $\hat{\rho}$.

Démonstration. On a (utilisant que $\text{Tr}(|\psi\rangle\langle\varphi|) = \langle\varphi|\psi\rangle$)

$$\begin{aligned}\text{Tr}(\hat{\rho}\mathcal{P}_j) &= \text{Tr}\left(\sum_i p_i \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle} \mathcal{P}_j\right) \\ &= \sum_i p_i \frac{\langle\psi_i|\mathcal{P}_j\psi_i\rangle}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle} = \sum_i p_i \cdot p_\psi(a_j) = p(a_j)\end{aligned}$$

Et comme $\hat{A} = \sum_j a_j \mathcal{P}_j$,

$$\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \sum_j a_j \text{Tr}(\hat{\rho}\mathcal{P}_j) = \sum_j a_j p(a_j) = \langle A \rangle$$

Inversement, montrons que on peut reconstruire $\hat{\rho}$ à partir de la connaissance des probabilités $p(a_j)$ pour toute observable \hat{A} : on verra ci-dessous que $\hat{\rho}$ admet une décomposition spectrale $\hat{\rho} = \sum_i \rho_i \mathcal{P}_{\phi_i}$. Prenons $\hat{A} = \mathcal{P}_{\phi_i}$; on obtient $\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \rho_i$, ce qui permet de reconstruire $\hat{\rho}$. \square

Exemple 9.1.5. Illustrons le fait que l'opérateur densité $\hat{\rho}$ caractérise le système quantique sur l'exemple d'un spin 1/2. L'espace quantique est $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$. Les ensembles statistiques

$$|+z\rangle, p_+ = \frac{1}{2}, \quad |-z\rangle, p_+ = \frac{1}{2},$$

et

$$|+x\rangle, p_+ = \frac{1}{2}, \quad |-x\rangle, p_+ = \frac{1}{2},$$

donnent tous les deux la même matrice densité $\hat{\rho} = \frac{1}{2}\text{Id}$ et sont donc indentiques. Sachant que

$$|\pm x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+z\rangle \pm |-z\rangle)$$

cela peut paraître paradoxal. En effet en mécanique classique un mélange de pièces noires et blanches n'est pas équivalent à un mélange de pièces (demi noire/ demi blanche) et (demi blanche/ demi noire).

9.1. DESCRIPTION D'UN ENSEMBLE STATISTIQUE D'ÉTATS QUANTIQUES PAR UN OPÉRATEUR

Proposition 9.1.6. *Un opérateur $\hat{\rho}$ est un opérateur densité si et seulement si c'est un opérateur autoadjoint dont les valeurs propres réelles ρ_j vérifient*

$$0 \leq \rho_j \leq 1 \text{ et } \sum_j \rho_j = 1.$$

En notant $(\phi_j)_j$ une base orthonormée de vecteurs propres de $\hat{\rho}$, et $\mathcal{P}_{\phi_j} = \frac{|\phi_j\rangle\langle\phi_j|}{\langle\phi_j|\phi_j\rangle}$, on peut écrire :

$$\hat{\rho} = \sum_j \rho_j \mathcal{P}_{\phi_j}$$

et interpréter $\hat{\rho}$ comme l'opérateur densité associé à l'ensemble statistique des états ϕ_j avec les probabilités respectives ρ_j .

Démonstration. Supposons que $\hat{\rho}$ est un opérateur densité (9.1.1). Il est clair que $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$ est autoadjoint. Ses valeurs propres réelles ρ_j vérifient

$$\sum_j \rho_j = \text{Tr}(\hat{\rho}) = \sum_i p_i \text{Tr}\left(\frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle}\right) = \sum_i p_i = 1$$

Il reste à montrer que $\rho_j \geq 0$. Pour cela si $v \in \mathcal{H}$ est un vecteur quelconque alors

$$\langle v|\hat{\rho}v\rangle = \sum_i p_i \frac{\langle v|\psi_i\rangle\langle\psi_i|v\rangle}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle} = \sum_i p_i \frac{|\langle\psi_i|v\rangle|^2}{\|\psi_i\|^2} \geq 0$$

(on dit que c'est un **opérateur positif**) donc en particulier pour $v = \phi_j$ (associé à la valeur propre ρ_j) on a

$$0 \leq \langle\phi_j|\hat{\rho}\phi_j\rangle = \rho_j.$$

La réciproque est immédiate. □

Remarque 9.1.7.

- La condition $\sum_j \rho_j = 1$ s'écrit aussi

$$\text{Tr}\hat{\rho} = 1.$$

- $\hat{\rho}$ est un état pur si et seulement si ses valeurs propres sont

$$\rho_1 = 1, \quad \rho_2 = \rho_{i \geq 2} \dots = 0$$

Exercice 9.1.8. Montrer que $\hat{\rho}$ est un état pur si et seulement si

$$\text{Tr}\hat{\rho}^2 = 1$$

9.1.2 Formulation du postulat de la mesure avec la matrice densité

Le postulat de la mesure énoncé en 9.1.1 peut être réformulé de la façon suivante :

Proposition 9.1.9. “le postulat de la mesure” : Si un système quantique est décrit par l’opérateur densité $\hat{\rho}$, si \hat{A} est un opérateur autoadjoint (observable) associé à une mesure alors après la mesure de la grandeur A , l’opérateur densité devient

$$\hat{\rho}' = \sum_j \mathcal{P}_j \hat{\rho} \mathcal{P}_j \quad (9.1.3)$$

où \mathcal{P}_j est le projecteur spectral sur l’espace propre de la valeur propre a_j de \hat{A} . C’est à dire que $\hat{\rho}$ devient diagonale en blocs par rapport à la décomposition spectrale de \hat{A} .

Démonstration. Avant la mesure, on a une distribution statistique d’états ψ_i avec probabilité p_i . La matrice densité correspondante est $\rho = \sum_i p_i \mathcal{P}_{\psi_i}$. D’après le postulat de la mesure, Affirmation 9.1.2, après la mesure, chaque état ψ_i donne une distribution statistique d’états $\psi'_{i,j} = \mathcal{P}_j \psi_i$ avec la probabilité $p_{i,j} = p_i \frac{\langle \psi_i | \mathcal{P}_j \psi_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle}$. La matrice densité correspondante est donc

$$\rho' = \sum_{i,j} p_{i,j} \mathcal{P}_{\psi'_{i,j}} = \sum_{i,j} p_i \frac{\langle \psi_i | \mathcal{P}_j \psi_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle} \left(\frac{\mathcal{P}_j | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \mathcal{P}_j}{\langle \mathcal{P}_j \psi_i | \mathcal{P}_j \psi_i \rangle} \right) = \sum_j \mathcal{P}_j \hat{\rho} \mathcal{P}_j$$

On a utilisé que $\langle \mathcal{P}_j \psi_i | \mathcal{P}_j \psi_i \rangle = \langle \psi_i | \mathcal{P}_j \psi_i \rangle$. □

Remarque 9.1.10. L’opérateur (9.1.3) est diagonal par blocs. D’après l’interprétation statistique de l’opérateur densité, il décrit une superposition statistique d’évènements j , et la probabilité de l’évènement j est la trace du bloc et donne :

$$\text{Tr} (\mathcal{P}_j \hat{\rho} \mathcal{P}_j) = \text{Tr} (\hat{\rho} \mathcal{P}_j^2) = \text{Tr} (\hat{\rho} \mathcal{P}_j) = p(a_j)$$

d’après (9.1.2). C’est exactement ce que donne le postulat de la mesure.

Dans la section suivante nous évoquerons la “**théorie de la décohérence**” qui propose des mécanismes qui permettent d’expliquer de façon dynamique comment l’opérateur densité peut évoluer d’un état initial quelconque $\hat{\rho}$ vers l’expression (9.1.3) dans le cadre de l’interaction avec un système de mesure et avec l’environnement.

9.1.3 Opérateur densité pour un système à deux états

Un système à deux états est un système quantique dont l’espace quantique est $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, de dimension 2. C’est le cas par exemple du spin 1/2.

9.1. DESCRIPTION D'UN ENSEMBLE STATISTIQUE D'ÉTATS QUANTIQUES PAR UN OPÉRAT

On rappelle que $\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ sont les matrices de Pauli définies en (4.3.5) :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Proposition 9.1.11. *Dans l'espace quantique $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, un opérateur densité $\hat{\rho}$ s'écrit toujours sous la forme*

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (\text{Id} + \vec{P} \cdot \hat{\sigma})$$

*caractérisé par un vecteur $\vec{P} \in \mathbb{R}^3$, vérifiant $|\vec{P}| \leq 1$, appelé **vecteur polarisation**. De plus, $\hat{\rho}$ est **un état pur** si et seulement si $|\vec{P}| = 1$. On dit que $\hat{\rho}$ est l'**état non polarisé** si $\vec{P} = \vec{0}$ soit $\hat{\rho} = \frac{1}{2}\text{Id}$.*

Démonstration. Toute matrice hermitienne 2×2 de trace 1 peut s'écrire sous la forme $\frac{1}{2} (\text{Id} + \vec{P} \cdot \hat{\sigma})$ avec $\vec{P} \in \mathbb{R}^3$. Les 2 valeurs propres sont alors $\rho_{\pm} = \frac{1}{2} (1 \pm |\vec{P}|)$. La condition supplémentaire $0 \leq \rho_{\pm} \leq 1$ donne $|\vec{P}| \leq 1$. \square

9.1.4 Equation d'évolution

Proposition 9.1.12. *Si $\hat{H}(t)$ est l'opérateur Hamiltonien qui fait évoluer chaque état de l'ensemble statistique selon $i\hbar \frac{d\psi_i}{dt} = \hat{H}(t) \psi_i(t)$ alors l'opérateur densité associé évolue selon*

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{-i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

*appelée **équation de Liouville quantique**.*

Remarque 9.1.13. Cela ressemble à l'équation de transport de Liouville $\frac{\partial f}{\partial t} = \{H, f\}$ en mécanique analytique [Fau10c].

Démonstration. On a

$$\hat{\rho}(t) = \sum_i p_i \frac{|\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)|}{\langle \psi_i(t) | \psi_i(t) \rangle}$$

où $\psi_i(t) = \hat{U}(t) \psi_i(0)$ avec $\frac{d\hat{U}}{dt} = \frac{-i}{\hbar} \hat{H} \cdot \hat{U}(t)$. On a aussi $\langle \psi_i(t) | \psi_i(t) \rangle = \langle \psi_i(0) | \psi_i(0) \rangle$. Remarquer que les poids de probabilité p_i sont constant au cours du temps. Donc

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) &= \sum_i p_i \frac{\hat{U}(t) |\psi_i(0)\rangle \langle \psi_i(0) | \hat{U}(t)^\dagger}{\langle \psi_i(0) | \psi_i(0) \rangle} \\ &= \hat{U}(t) \hat{\rho}(0) \hat{U}(t)^\dagger \end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}}{dt} &= \frac{d\hat{U}}{dt} \hat{\rho}(0) \hat{U}(t)^\dagger + \hat{U}(t) \hat{\rho}(0) \frac{d\hat{U}^\dagger}{dt} \\ &= \frac{-i}{\hbar} \left(\hat{H} \hat{U} \hat{\rho}(0) \hat{U}^\dagger - \hat{U} \hat{\rho}(0) \hat{U}^\dagger \hat{H} \right) = \frac{-i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] \end{aligned}$$

□

9.1.5 Entropie de l'ensemble statistique

Lire³ “history of entropy” sur wikipedia.

On commence par définir l'entropie de Shannon (ou entropie de Kolmogorov-Sinaï) pour un système dynamique simple que l'on appelle “dynamique de Bernouilli”.

9.1.5.1 Entropie de Shannon pour une dynamique de Bernouilli

Considérons un ensemble de n évènements possibles $\{1, 2, \dots, n\}$ ayant chacun la probabilité p_i , $i = 1, \dots, n$ vérifiant $\sum_i p_i = 1$. (C'est une **loi de probabilité**). Soit $N \geq 1$. Considérons une suite de N réalisations aléatoires indépendantes :

$$\vec{i} := (i_1, i_2, \dots, i_N) \quad (9.1.4)$$

où chaque valeur $i_j \in \{1, 2, \dots, n\}$ apparait avec la probabilité p_{i_j} . Comme les évènements de la suite \vec{i} sont indépendants, la probabilité pour que cette suite \vec{i} apparaisse est le produit :

$$p(\vec{i}) = p_{i_1} \cdot p_{i_2} \cdot \dots \cdot p_{i_N} \quad (9.1.5)$$

Remarquons qu'il y a $n^N = e^{N \log n}$ suites possibles.

Avant de donner le résultat général de Shannon, présentons deux exemples simples afin de développer l'intuition.

3. (ref : wikipedia “history of entropy”) L'histoire raconte que en 1949 Claude Shannon qui travaillait en télécommunication au BELL labs a développé la théorie qui suit, en définissant une fonction H qu'il voulait appeler “incertitude”. Il rencontre le physicien-mathématicien Von Neumann. Ce dernier lui fait remarquer qu'il devrait appeler sa fonction “entropie” pour deux raisons : 1) car cela correspond au concept de l'entropie développée depuis Boltzmann et Gibbs 1872 qui mesure le “désordre”, et 2) car il deviendrait célèbre en donnant enfin une explication claire de ce qu'est l'entropie.

9.1. DESCRIPTION D'UN ENSEMBLE STATISTIQUE D'ÉTATS QUANTIQUES PAR UN OPÉRAT

Exemple 9.1.14. Considérons par exemple le cas très simple

$$n = 3, \quad p_1 = p_2 = 0.5, \quad p_3 = 0 \quad (9.1.6)$$

Pour N donné, il y a $3^N = e^{N \log 3}$ suites possibles. Les suites \vec{i} ne contenant pas le chiffre 3, de la forme

$$(1, 2, 2, 1, \dots, 2) \quad (9.1.7)$$

et ont chacune la probabilité

$$p(\vec{i}) = \left(\frac{1}{2}\right)^N = e^{-N \log 2}$$

Le nombre total de telles suites est

$$\mathcal{N} = 2^N = e^{N \log 2}$$

(ce qui est très peu par rapport au total car $2^N/3^N = \left(\frac{2}{3}\right)^N \rightarrow 0$ pour $N \rightarrow \infty$). Les suites contenant le chiffre 3 comme

$$(1, 2, 3, 2, 1, \dots, 2) \quad (9.1.8)$$

sont chacune de probabilité nulle car $p_3 = 0$.

Exemple 9.1.15. Considérons le cas un peu moins simple avec $n = 2$ et

$$p_1 = 2/3 \simeq 0.7 > p_2 = 1/3 \simeq 0.3$$

Nous allons traiter cet exemple de façon non rigoureuse, mais cela va nous faire deviner le résultat présenté dans le théorème de Shannon qui va suivre. Il y a $2^N = e^{N \log 2}$ suites possibles. La suite qui est individuellement la plus probable est

$$\vec{i} = (1, 1, 1 \dots) \quad (9.1.9)$$

avec $p(\vec{i}) = p_1^N = e^{-N \log(1/p_1)}$, mais elle est unique (on dit que c'est une suite "non standard"). La suite

$$\vec{i} = (2, 2, 2, 2 \dots) \quad (9.1.10)$$

est au contraire très peu probable mais elle est aussi unique. On dit aussi que c'est une suite "non standard". Au contraire une "suite standard" est de la forme :

$$\vec{i} = (1, 2, 1, 1, 2, 1, 2, 1, 1, 1, 2, \dots) \quad (9.1.11)$$

avec un nombre d'apparition de 1 qui est $N_1 \simeq p_1 N$ et de 2 qui est $N_2 \simeq p_2 N$. On estime que sa probabilité d'apparition est donc de l'ordre de

$$\begin{aligned} p_s = p(\vec{i}) &= p_1^{N_1} p_2^{N_2} = e^{N_1 \log p_1 + N_2 \log p_2} = e^{-N(-p_1 \log p_1 - p_2 \log p_2)} \\ &= e^{-NS} \end{aligned}$$

avec

$$S = -p_1 \log p_1 - p_2 \log p_2 > 0$$

appelée **entropie**. Par ailleurs, on estime que le nombre de telles suites standard est le nombre de façon de choisir N_1 éléments parmi N , soit :

$$\mathcal{N}_N \simeq C_N^{N_1} \simeq \frac{N!}{N_1!N_2!}$$

En utilisant la formule de Stirling $\log N! \simeq N \log N + \dots$ cela donne

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_N &\simeq e^{\log N! - \log N_1! - \log N_2!} \simeq e^{N \log N - (p_1 N) \log(p_1 N) - (p_2 N) \log(p_2 N)} \\ &\simeq e^{N(-p_1 \log p_1 - p_2 \log p_2)} = e^{NS} \end{aligned}$$

Il apparait que $\mathcal{N}_N \cdot p_s \simeq 1$ et donc, avec probabilité 1, toutes les suites qui apparaissent sont “standard”. Remarquons finalement que $S < \log 2$ donc

$$\mathcal{N}_N = e^{NS} \ll 2^N = e^{N \log 2}$$

ce qui signifie qu’il y a très peu de suites standard.

Le théorème qui suit de Shannon et MacMullen précise ce résultat un cas plus général.

9.1. DESCRIPTION D'UN ENSEMBLE STATISTIQUE D'ÉTATS QUANTIQUES PAR UN OPÉRAT

Théorème 9.1.16. (Shannon, MacMillan 1949)(cf Khinchin p.17, Zinmeister p.22).
 Pour une loi de probabilité (p_1, p_2, \dots, p_n) données, la quantité suivante :

$$S = - \sum_i p_i \log p_i \quad (9.1.12)$$

appelée l'**entropie de Shannon**, est telle que pour $N \gg 1$, parmi toutes les $n^N = e^{N \log n}$ suites possibles de la forme (9.1.4), seulement le nombre

$$\mathcal{N}_N = e^{NS}$$

d'entre elles peuvent effectivement apparaître et la majorité d'entre elles ont la probabilité

$$p_s = e^{-NS}$$

Elles sont appelées "**suites standard**" (comme (9.1.11)).

Parmi les autres suites (au total improbables) appelées "**suites non standard**", il y a des suites en grand nombre mais de très faible probabilité (comme (9.1.10)), ou des suites plus probables mais en très petit nombre comme (9.1.9).

L'entropie vérifie :

$$0 \leq S \leq \log n \quad (9.1.13)$$

Le **maximum d'entropie** est pour la loi uniforme où tous les événements sont équiprobables : $p_i = 1/n$ donnant $S = \log n$. Au contraire, le **minimum d'entropie** est $S = 0$ obtenu pour un événement totalement prévisible comme $p_1 = 1, p_2 = \dots = p_n = 0$. (remarquer que $p_i \log p_i \xrightarrow{p_i \rightarrow 0} 0$).

Remarque 9.1.17.

- On peut aussi retenir la formule :

$$S = \frac{1}{N} \log \mathcal{N}_N$$

qui montre que (par définition) l'entropie mesure le taux de croissance exponentiel du nombre \mathcal{N}_N des suites standard de longueur N .

- Dans l'exemple (9.1.6), l'entropie est $S = -\frac{1}{2} \log \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \log \frac{1}{2} = \log 2$ conformément à (??).
- (*) Un énoncé plus précis (mathématiquement) est que pour $N \rightarrow \infty$, on peut diviser l'ensemble des n^N suites en deux ensembles : \mathcal{A} (suites standard) et \mathcal{B} (suites non standard) tels que (rappel $o(1)$ désigne un terme qui tend vers 0 pour $N \rightarrow \infty$).

$$\forall \vec{i} \in \mathcal{A}, \quad e^{-NS(1+o(1))} \leq p(\vec{i}) \leq e^{-NS(1-o(1))} \quad (9.1.14)$$

$$e^{NS(1-o(1))} \leq \#\mathcal{A} \leq e^{NS(1+o(1))} \quad (9.1.15)$$

$$\sum_{\vec{i} \in \mathcal{A}} p(\vec{i}) = 1 - o(1), \quad \sum_{\vec{i} \in \mathcal{B}} p(\vec{i}) = o(1) \quad (9.1.16)$$

le facteur $o(1)$ qui apparait provient de “la loi des grands nombres”. En utilisant le “théorème central limite” qui est plus précis, on peut remplacer $o(1)$ par $\frac{1}{N^{1/2-\varepsilon}}$ pour tout $\varepsilon > 0$.

Démonstration. (*) (Zinmeister p.22). L’astuce est de faire apparaitre une somme de Birkhoff de variables aléatoires indépendantes. D’après (9.1.5) on écrit

$$\begin{aligned} p(\vec{i}) &= p_{i_1} \cdot p_{i_2} \cdots p_{i_N} = e^{\sum_j \log p_{i_j}} \\ &= e^{-\sum_j X_j} \end{aligned}$$

en posant

$$X_j := -\log p_{i_j}$$

Les variables aléatoires X_j sont indépendantes, de même loi, et de moyenne qui est précisément l’entropie :

$$\langle X_j \rangle = \sum_{i=1}^n p_i (-\log p_i) = S$$

Considérons la somme moins la moyenne :

$$\mathcal{S} := \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (X_j - S) \quad (9.1.17)$$

ainsi on peut exprimer :

$$p(\vec{i}) = e^{-NS(1+\mathcal{S})}$$

La **loi (faible) des grands nombre** (cf Proposition 9.1.18) dit que \mathcal{S} “converge vers 0” au sens ou pour tout $\alpha > 0$ (arbitrairement petit) et pour $N \rightarrow \infty$,

$$\text{proba}(|\mathcal{S}| < \alpha) = 1 - o(1) \quad (9.1.18)$$

Donc on définit les suites standard par

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_\alpha &:= \left\{ \vec{i} \text{ tq } -\alpha < \mathcal{S} < \alpha \right\} \\ &= \left\{ \vec{i} \text{ tq } p(\vec{i}) \in [e^{-NS(1+\alpha)}, e^{-NS(1-\alpha)}] \right\} \end{aligned}$$

Cela donne (9.1.14). On a d’après la loi des grands nombres

$$\sum_{\vec{i} \in \mathcal{A}_\alpha} p(\vec{i}) = 1 - o(1)$$

donnant (9.1.16). Par conséquence

$$(\#\mathcal{A}) \cdot e^{-NS(1+\alpha)} \leq 1 - o(1) \quad \text{et} \quad (\#\mathcal{A}) \cdot e^{-NS(1-\alpha)} \geq 1 + o(1)$$

donnant (9.1.15). □

9.1. DESCRIPTION D'UN ENSEMBLE STATISTIQUE D'ÉTATS QUANTIQUES PAR UN OPÉRAT

Il reste à justifier la loi des grands nombres utilisée dans (9.1.18). (réf : cf wikipedia).

Proposition 9.1.18. “*La loi faible des grands nombres*”. Supposons que $(X_j)_{j \in \mathbb{N}}$ sont des variables aléatoires indépendantes, de même moyenne $\langle X \rangle$ et même variance $\sigma^2 = \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle$. Pour $N \geq 1$, on pose

$$\mathcal{S}_N := \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (X_j - \langle X \rangle)$$

qui est la “moyenne temporelle centrée”. Alors pour tout $\alpha > 0$ (arbitrairement petit) et pour $N \rightarrow \infty$,

$$\text{proba}(|\mathcal{S}_N| > \alpha) = o(1)$$

Démonstration. Notons pour simplifier $Z = |\mathcal{S}|^2$ et $p(Z) dZ$ la densité de probabilité. On a

$$\begin{aligned} \text{proba}(|\mathcal{S}| > \alpha) &= \text{proba}(|\mathcal{S}|^2 > \alpha^2) \\ &= \int_{\alpha^2}^{\infty} p(Z) dZ \leq \int_{\alpha^2}^{\infty} \left(\frac{Z}{\alpha^2}\right) p(Z) dZ \\ &= \frac{1}{\alpha^2} \int_{\alpha^2}^{\infty} Z p(Z) dZ \leq \frac{1}{\alpha^2} \int_0^{\infty} Z p(Z) dZ \\ &= \frac{1}{\alpha^2} \langle Z \rangle = \frac{1}{\alpha^2} \langle |\mathcal{S}|^2 \rangle \end{aligned}$$

où $\langle \cdot \rangle$ désigne la moyenne. (Ce dernier calcul s’appelle “inégalité de Tchebychev”). On a $\langle (X_j - \langle X \rangle) \rangle = \langle X \rangle - \langle X \rangle = 0$ et donc pour $j \neq k$ $\langle (X_j - \langle X \rangle) (X_k - \langle X \rangle) \rangle = \langle (X_j - \langle X \rangle) \rangle \langle (X_k - \langle X \rangle) \rangle = 0$. Alors d’après (9.1.17)

$$\begin{aligned} \langle |\mathcal{S}|^2 \rangle &= \frac{1}{N^2} \sum_{j,k} \langle (X_j - \langle X \rangle) (X_k - \langle X \rangle) \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_j \langle (X_j - \langle X \rangle)^2 \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sigma^2 \rightarrow 0 \end{aligned}$$

On déduit que $\text{proba}(|\mathcal{S}| > \alpha) = o(1)$. □

@@Tracer la loi de proba de X en faisant apparaître les évènements extrêmes et la convergence vers la moyenne@@

Exercice 9.1.19. (voir TD) Considérons les évènements⁴ possibles $i \in \mathbb{N}$ et considérons la “loi de probabilité de Boltzmann”

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta i}$$

où $\beta = \frac{1}{kT}$, T est la “température” et Z est un facteur de normalisation de sorte que $\sum_i p_i = 1$.

1. Calculer Z en fonction de β (aussi appelé **fonction de partition**).
2. Calculer l’entropie S en fonction de β .
3. Donner l’expression de S (les premiers termes du développement limité) pour $\beta \rightarrow 0$ (haute température)
4. Donner l’expression de S (les premiers termes du développement limité) pour $\beta \rightarrow \infty$ (basse température)

9.1.5.2 Entropie en mécanique quantique

Revenons à la mécanique quantique et à un ensemble statistique d’états quantiques décrits par l’opérateur densité $\hat{\rho}$.

Pour caractériser l’incertitude sur le résultat de mesure d’une observable \hat{A} sur l’état $\hat{\rho}$, il faut considérer la loi de probabilité $p(a_j) = \text{Tr}(\mathcal{P}_j \hat{\rho})$ donnée en (9.1.2).

Définition 9.1.20. Conformément à la définition (9.1.12), l’**entropie d’un ensemble statistique d’états quantique** décrits par l’opérateur densité $\hat{\rho}$, relatif à la mesure d’une observable \hat{A} est :

$$S(\hat{\rho}, \hat{A}) = - \sum_j p(a_j) \log p(a_j) = - \sum_j \text{Tr}(\mathcal{P}_j \hat{\rho}) \log \text{Tr}(\mathcal{P}_j \hat{\rho})$$

Le minimum de $S(\hat{\rho}, \hat{A})$ sur toutes les observables \hat{A} possibles est appelé **entropie de l’état $\hat{\rho}$** :

$$S(\hat{\rho}) := \min_{\hat{A}} S(\hat{\rho}, \hat{A})$$

4. Ce modèle correspond par exemple aux niveaux d’énergie de l’oscillateur harmonique. En effet l’oscillateur harmonique a les niveaux d’énergie $E_i = \hbar\omega (i + \frac{1}{2})$ avec $i \in \mathbb{N}$, et d’après la loi de Boltzmann, la probabilité pour que la particule soit au niveau i d’énergie E_i s’écrit comme dans cet exercice :

$$\frac{1}{Z'} e^{-\frac{E_i}{kT}} = \frac{1}{Z'} e^{-\frac{\hbar\omega(i+1/2)}{kT}} = \frac{1}{Z} e^{-\beta i}$$

avec $\beta = \frac{\hbar\omega}{kT}$ et $\frac{1}{Z} = \frac{1}{Z'} e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}}$.

Proposition 9.1.21. *L'entropie de l'état $\hat{\rho}$ est donnée par*

$$S(\hat{\rho}) := - \sum_i \rho_i \log \rho_i = -\text{Tr}(\hat{\rho} \log \hat{\rho}) \quad (9.1.19)$$

où ρ_i sont les valeurs propres de $\hat{\rho}$. Il est obtenu pour $\hat{A} = \hat{\rho}$, c'est à dire que $S(\hat{\rho}, \hat{\rho}) = S(\hat{\rho})$. En particulier $\hat{\rho}$ est un **état pur** si et seulement si $S(\hat{\rho}) = 0$.

Remarque 9.1.22.

1. Pour expliquer l'écriture dans (9.1.19) : si \hat{A} est un opérateur auto-adjoint et si $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction analytique, i.e. qui admet un développement de Taylor $f(x) = f(0) + x f'(0) + x^2 \frac{f''(0)}{2} + \dots$ convergent, alors on utilise ce développement pour définir

$$f(\hat{A}) = f(0) + \hat{A} f'(0) + \hat{A}^2 \frac{f''(0)}{2} + \dots$$

(qui est une série convergente si \hat{A} est un opérateur borné). De plus, \hat{A} se diagonalise

$$\hat{A} = \hat{U} D \hat{U}^{-1}$$

où \hat{U} est un opérateur unitaire et $D = \text{Diag}(a_1, a_2, \dots)$ est une matrice diagonale avec les valeurs propres a_j sur la diagonale. Remarquons que pour tout $n \geq 1$

$$\hat{A}^n = (\hat{U} D \hat{U}^{-1}) (\hat{U} D \hat{U}^{-1}) \dots (\hat{U} D \hat{U}^{-1}) = \hat{U} D^n \hat{U}^{-1}$$

donc on a :

$$f(\hat{A}) = \hat{U} f(D) \hat{U}^{-1}$$

où $f(D) = \text{Diag}(f(a_1), f(a_2), \dots)$ est une matrice diagonale. En particulier on a

$$\begin{aligned} \text{Tr}(f(\hat{A})) &= \text{Tr}(\hat{U} f(D) \hat{U}^{-1}) = \text{Tr}(\hat{U}^{-1} \hat{U} f(D)) = \text{Tr}(f(D)) \\ &= \sum_j f(a_j) \end{aligned}$$

Le cas $f(x) = -x \log x$ et $\hat{A} = \hat{\rho}$ donne eq.(9.1.19).

2. En mécanique classique (ou en théorie de l'information), une entropie nulle signifie par définition que les événements qui vont survenir sont totalement prévisibles (il n'y a qu'une possibilité). En mécanique quantique, $S(\hat{\rho}) = 0$ signifie que $\hat{\rho}$ est un état pur ψ , et non pas une superposition statistique d'états. Cela n'empêche pas que si l'on fait des mesures d'observables \hat{A} , les résultats sont non prévisibles en général car la distribution de probabilité dépend de ψ et de l'observable \hat{A} . Cela correspond

au fait que l'entropie $S(\hat{\rho}, \hat{A})$ est non nulle en général.

Par exemple si un spin $1/2$ est dans l'état pur $|+_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_z\rangle + |-_z\rangle)$ ($\hat{\rho} = |+_x\rangle\langle+_x|$) on a $S(\hat{\rho}) = 0$ selon (9.1.19). Si on mesure le spin selon z avec l'observable \hat{S}_z alors on a les probabilités $p_{\pm} = \frac{1}{2}$, et la définition ci-dessus donne $S(\hat{\rho}, \hat{S}_z) = \log 2$. Si on mesure le spin selon x avec l'observable \hat{S}_x alors on a les probabilités $p_+ = 1, p_- = 0$, et la définition ci-dessus donne $S(\hat{\rho}, \hat{S}_x) = 0 = S(\hat{\rho})$

9.2 Opérateur densité partielle pour un système composé

9.2.1 Rappels sur les systèmes composés

Il est assez courant en physique qu'un système soit composé de sous systèmes plus élémentaires. On a vu que si un système est composé de deux sous systèmes A et B , et si l'espace quantique du système A est \mathcal{H}_A (respect. \mathcal{H}_B pour B) alors l'espace quantique du système total est l'espace produit tensoriel :

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$$

Remarque : le terme sous système est ici au sens large. Ce peut être des degrés de liberté interne comme le spin.

Rappelons que si $(|e_i\rangle)_i$ forme une base o.n. de \mathcal{H}_A et $|f_j\rangle$ une base o.n. de \mathcal{H}_B alors

$$|e_i\rangle \otimes |f_j\rangle = |e_i, f_j\rangle$$

forme une base o.n. de $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ et donc dans le cas d'espace de dimension finie,

$$\dim \mathcal{H}_{tot} = \dim \mathcal{H}_A \cdot \dim \mathcal{H}_B$$

Exemples de systèmes composés :

- l'atome d'hydrogène est formé de proton et électron. Alors

$$\mathcal{H}_{\text{atome H}} = \mathcal{H}_{\text{proton}} \otimes \mathcal{H}_{\text{electron}}$$

- Pour électron (de spin $1/2$) :

$$\mathcal{H}_{\text{electron}} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$$

- Pour deux particules de spin $1/2$ (on ne décrit que les spins)

$$\mathcal{H} = \mathbb{C}_{(1)}^2 \otimes \mathbb{C}_{(2)}^2$$

L'état quantique du système total peut être :

$$|\psi_1\rangle = |+_z\rangle \otimes |+_z\rangle$$

(i.e. les deux particules ont le spin up selon z) ou encore

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+_z\rangle \otimes |+_z\rangle + |-_z\rangle \otimes |-_z\rangle)$$

- Un exemple qui va nous intéresser particulièrement est : A : système étudié (par exemple une molécule) et B : le reste de l'univers, appelé "environnement". Naturellement dans cet exemple extrême on ne connaît pas le système B (l'univers...), mais on peut connaître comment il interagit avec A (ce seront les particules de gaz ou molécules voisines de A , ou photons de lumière incidents,...) :

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_{environnement}$$

Notons Id_A l'opérateur identité dans l'espace \mathcal{H}_A . Soit $|f_j\rangle$ un vecteur de base fixé de \mathcal{H}_B . Les opérateurs suivant serviront dans la définition qui va suivre :

$$\text{Id}_A \otimes \langle f_j| \quad : \mathcal{H}_{tot} \rightarrow \mathcal{H}_A$$

$$\text{Id}_A \otimes |f_j\rangle \quad : \mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{H}_{tot}$$

Définition 9.2.1. Si $\hat{T} : \mathcal{H}_{tot} \rightarrow \mathcal{H}_{tot}$ est un opérateur linéaire dans $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ alors on définit sa **trace partielle** par rapport à B comme étant l'opérateur

$$\text{Tr}_B(\hat{T}) : \mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{H}_A$$

définit par

$$\text{Tr}_B(\hat{T}) := \sum_j (\text{Id}_A \otimes \langle f_j|) \circ \hat{T} \circ (\text{Id}_A \otimes |f_j\rangle) \quad (9.2.1)$$

aussi noté plus simplement

$$\text{Tr}_B(\hat{T}) = \sum_j \langle f_j | \hat{T} | f_j \rangle$$

Cet opérateur aussi appelé **opérateur partiel**, ne dépend pas du choix de la base o.n. $(f_j)_j$.

Remarque : de même on définit $\text{Tr}_A(\hat{T}) := \sum_i \langle e_i | \hat{T} | e_i \rangle : \mathcal{H}_B \rightarrow \mathcal{H}_B$.

Nous allons voir maintenant l'intérêt de ces opérateurs partiels.

Proposition 9.2.2. *Si $\hat{\rho}$ est l'opérateur densité décrivant un système dans l'espace $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, alors l'opérateur densité partiel du sous système A est défini par*

$$\hat{\rho}_A := \text{Tr}_B(\hat{\rho}).$$

$\hat{\rho}_A$ décrit le système A au sens où pour toute observable de la forme $\hat{A}_{tot} = \hat{A} \otimes \text{Id}_B$ (c'est à dire n'agissant pas sur la partie B), les probabilités des résultats de la mesure sont donnés, d'après (9.1.2), par

$$p(a_j) = \text{Tr}(\hat{\rho}(\mathcal{P}_j \otimes \text{Id}_B)) = \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A \mathcal{P}_j)$$

où $\mathcal{P}_j : \mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{H}_A$, $j = 1, 2, \dots$ sont les projecteurs spectraux pour l'observable \hat{A} , Tr est la trace dans \mathcal{H}_{tot} et Tr_A la trace partielle dans \mathcal{H}_A . Autrement dit, l'opérateur densité partiel caractérise complètement le sous système A pour ce qui concerne des mesures portant sur lui.

Démonstration. D'après (9.1.2) on a

$$p(a_j) = \text{Tr}(\hat{\rho}(\mathcal{P}_j \otimes \text{Id}_B)) = \text{Tr}_A(\text{Tr}_B(\hat{\rho}(\mathcal{P}_j \otimes \text{Id}_B)))$$

On note $|f_l\rangle_l$ une base de \mathcal{H}_B . On remarque que (utilisant la relation de fermeture)

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B(\hat{\rho}(\mathcal{P}_j \otimes \text{Id}_B)) &= \sum_l \langle f_l | \hat{\rho}(\mathcal{P}_j \otimes \text{Id}_B) | f_l \rangle = \sum_{l,l'} \langle f_l | \hat{\rho} | f_{l'} \rangle \langle f_{l'} | (\mathcal{P}_j \otimes \text{Id}_B) | f_l \rangle \\ &= \sum_{l,l'} \langle f_l | \hat{\rho} | f_{l'} \rangle (\mathcal{P}_j \otimes \langle f_{l'} | f_l \rangle) = \sum_l \langle f_l | \hat{\rho} | f_l \rangle \mathcal{P}_j \\ &= \text{Tr}_B(\hat{\rho}) \mathcal{P}_j = \hat{\rho}_A \mathcal{P}_j \end{aligned}$$

Donc $p(a_j) = \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A \mathcal{P}_j)$. □

Exemple 9.2.3. Considérons deux spins 1/2.

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathbb{C}_{(1)}^2 \otimes \mathbb{C}_{(2)}^2$$

1. Pour l'état

$$|\psi_1\rangle = |+_z\rangle_{(1)} \otimes |+_z\rangle_{(2)} = |+, +\rangle \quad (9.2.2)$$

qui est un état pur dans \mathcal{H}_{tot} , on a

$$\hat{\rho} = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| = |+, +\rangle\langle+, +|$$

et (on détaille la définition (9.2.1))

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}) &= (I \otimes \langle + |) |+, +\rangle\langle+, +| (I \otimes | + \rangle) + (I \otimes \langle - |) |+, +\rangle\langle+, +| (I \otimes | - \rangle) \\ &= |+\rangle\langle+| \end{aligned} \quad (9.2.3)$$

Cet état partiel est un état pur. Sa matrice densité (dans la base $|+\rangle, |-\rangle$) est

$$\hat{\rho}_A \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Son entropie est $S(\hat{\rho}_A) = 0$.

2. Pour l'état

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+_z\rangle \otimes |+_z\rangle + |-_z\rangle \otimes |-_z\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|++\rangle + |--\rangle) \quad (9.2.4)$$

qui est un état pur dans \mathcal{H}_{tot} , on a

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= |\psi_2\rangle\langle\psi_2| = \frac{1}{2} (|++\rangle + |--\rangle) (\langle++| + \langle--|) \\ &= \frac{1}{2} (|++\rangle\langle++| + |++\rangle\langle--| + |--\rangle\langle++| + |--\rangle\langle--|) \end{aligned}$$

et

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}) = \frac{1}{2} (|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|) \quad (9.2.5)$$

C'est état partiel n'est pas un état pur. Sa matrice densité (dans la base $|+\rangle, |-\rangle$) est diagonale

$$\hat{\rho}_A \equiv \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

C'est un état mélangé (non pur). Son entropie est

$$S(\hat{\rho}_A) = -\frac{1}{2} \log \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \log \frac{1}{2} = \log 2$$

C'est l'entropie maximale pour un système à deux états.

L'exemple précédent nous amène à la proposition et définition suivante :

Proposition 9.2.4. *Considérons un état pur d'un système composé $\psi \in \mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$.*

- *Si l'état partiel $\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho}$ est non pur, alors $\hat{\rho}_B = \text{Tr}_A \hat{\rho}$ est aussi non pur, et on dit que ψ est un état **enchevêtré** ou **corrélé**.*
- *Au contraire, si $\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho} = |\psi_A\rangle\langle\psi_A|$ est un état pur, alors $\hat{\rho}_B = |\psi_B\rangle\langle\psi_B|$ est aussi un état pur, et $\psi = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ est un **état produit** (non enchevêtré).*

Exemple : l'état partiel (9.2.3) est pur donc ψ_1 dans (9.2.2) n'est pas enchevêtré. Par contre (9.2.5) n'est pas pur, donc (9.2.4) est un état enchevêtré ou corrélé.

Remarque : en anglais, enchevêtré = "entangled".

9.2.2 Décomposition de Schmidt

Pour mettre en valeur la proposition suivante, remarquons que si $|e_i\rangle_i$ est une base de \mathcal{H}_A et $|f_j\rangle_j$ est une base de \mathcal{H}_B , donc $|e_i, f_j\rangle_{i,j}$ est une base de $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ et un état $\psi \in \mathcal{H}_{tot}$ se décompose dans cette base par une double somme :

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} |e_i, f_j\rangle \underbrace{\langle e_i, f_j | \psi \rangle}_{\psi_{i,j}} = \sum_{i,j} \psi_{i,j} |e_i, f_j\rangle$$

Proposition 9.2.5. “Décomposition de Schmidt d’un état pur du système total”.

Si $\psi \in \mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ alors il existe une base $|e_i\rangle_{i=1 \rightarrow I}$ de \mathcal{H}_A et une base $|f_j\rangle_{j=1 \rightarrow J}$ de \mathcal{H}_B (qui dépendent de ψ) telles que

$$|\psi\rangle = \sum_i^{\min(I,J)} \psi_i |e_i, f_i\rangle \quad (9.2.6)$$

avec des composantes positives $\psi_1 \geq \psi_2 \geq \dots \geq 0$, vérifiant $\sum_i \psi_i^2 = 1$. Par définition, le **rang de Schmidt** de ψ est le nombre de composantes ψ_i non nulles.

Démonstration. En utilisant l’identification (métrique) $\mathcal{H}_A \equiv \mathcal{H}_A^*$ le vecteur $\psi \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ s’identifie à $\psi \in \mathcal{H}_A^* \otimes \mathcal{H}_B$ et donc à un opérateur linéaire $\psi \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{H}_B)$. La décomposition de Schmidt (9.2.6) est une application directe de la décomposition en valeur singulières de cet opérateur $\psi \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{H}_B)$. Pour les détails, voir [Fau10b]. \square

Conséquence pour l’opérateur densité $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ de cet état pur :

Corollaire 9.2.6. Les opérateur densité partiels sont diagonaux dans la base de Schmidt :

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}) = \sum_i \psi_i^2 |e_i\rangle\langle e_i|$$

$$\hat{\rho}_B = \text{Tr}_A(\hat{\rho}) = \sum_i \psi_i^2 |f_i\rangle\langle f_i|$$

et donc $p_i = \psi_i^2$ sont des distributions de probabilité, et l’entropie de ces états partiels est

$$S(\hat{\rho}_A) = S(\hat{\rho}_B) = - \sum_i p_i \log p_i = - \sum_i \psi_i^2 \log \psi_i^2.$$

En particulier, ρ_A (et ρ_B) sont des états purs et $\psi = |e_1\rangle \otimes |f_1\rangle$ est un état produit si et seulement si $S(\hat{\rho}_A) = S(\hat{\rho}_B) = 0$. Sinon ψ est un état enchevêtré.

9.2.3 Un modèle simple de décohérence

Voir le TD “*Modèle simple de décohérence induit par l’environnement.*” Ce modèle est issu d’un article de Zureck (90’).