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

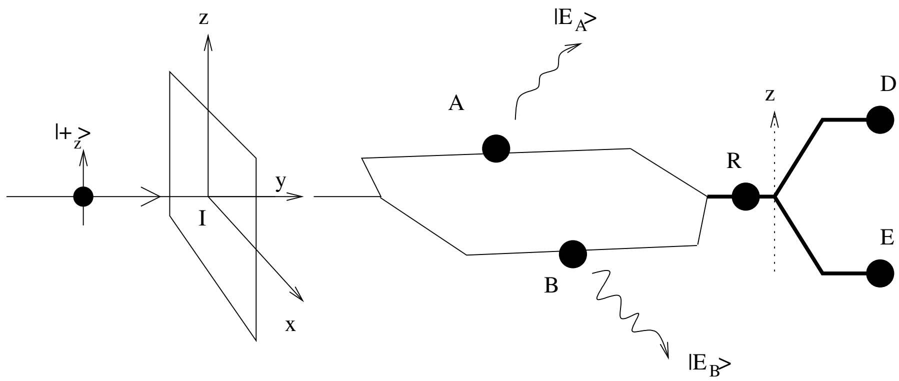
TD n°12
Modèle simple de décohérence induit par l'environnement. Mécanique quantique statistique.

---

1 Interférence de Young avec des spins 1/2

(cet exercice sert de préparation, pour donner un sens physique à l'exercice suivant. Il est très semblable à l'exercice 2 du TD sur le spin 1/2).

On considère un dispositif expérimental où un faisceau de particules de spin 1/2 (des neutrons par exemple) entre selon l'axe y. On suppose que chaque particule est préparée dans l'état de spin $|+_z\rangle$.



1. Ce faisceau polarisé entre dans un appareil de Stern-Gerlach dans le plan x qui a donc pour effet de décomposer l'état de spin $|+_z\rangle$ par rapport aux états $|+_x\rangle, |-_x\rangle$. Les deux faisceaux sont recombinés au point R en un seul faisceau avant de pénétrer à nouveau dans un appareil de Stern-Gerlach orienté selon z (voir figure). A la sortie, on place deux détecteurs aux points D et E. Décrire l'état aux points A, B puis au point R puis aux points D, E. Calculer les probabilités P_D, P_E de détecter les particules en D et E respectivement.
2. Même question si on place un absorbeur au point A (qui détecte et détruit la particule). Par analogie avec l'expérience des doubles fentes de Young, interpréter ces résultats en terme d'interférence.

3. Pour avoir une description plus fine du passage de la particule aux points A et B, on suppose maintenant que l'état de la particule est toujours dans l'état pur $|+_z\rangle$ au point I de départ, et isolé de l'environnement qui est dans l'état $|E\rangle$ initial ($\langle E|E\rangle = 1$ normalisé). Au passage au point A, la particule transforme l'état de l'environnement en $|E_A\rangle$ (normalisé) et de même, au point B elle modifie l'état de l'environnement en $|E_B\rangle$. Concrètement, ce peut être l'émission d'un photon au départ des points A ou B respectivement. Mathématiquement, la particule est décrite par son spin dans l'espace noté $\mathcal{H}_{spin} = \mathbb{C}^2$ et l'environnement est décrit par son état $|E\rangle \in \mathcal{H}_{env}$. L'espace total est $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{spin} \otimes \mathcal{H}_{env}$.
   (a) Décrire l'état total $\psi_{avant} \in \mathcal{H}_{tot}$ au point I et en A, B avant l'émission du photon, puis l'état total évolué ψ_{apres} en A, B après l'émission du photon. Dans cette écriture, commenter les "corrélations" entre l'état de la particule et l'état de l'environnement. Écrire l'état ψ_{apres} aux points D, E.
   (b) L'opérateur densité total avant est $\rho_{avant} = |\psi_{avant}\rangle\langle\psi_{avant}|$. Déduire [1] la matrice densité réduite $\tilde{\rho}_{avant} = \mathrm{Tr}_{env}(\rho_{avant})$ (dans la base $|\pm_z\rangle$, on a tracé sur $\mathcal{H}_{env}$) de la particule et de même $\tilde{\rho}_{apres} = \mathrm{Tr}_{env}(\rho_{apres})$, en fonction du produit scalaire $\langle E_A|E_B\rangle$.
   (c) Déduire les probabilités P_D, P_E de détecter les particules en D et E respectivement en fonction de $\langle E_A|E_B\rangle$. Discuter et interpréter physiquement les 2 cas extrêmes $\langle E_A|E_B\rangle = 1$ ou $\langle E_A|E_B\rangle = 0$. Dans chacun des cas écrire la matrice densité réduite $\tilde{\rho}_{apres}$ et le vecteur polarisation $\vec{P}$ du faisceau au point R, définit par $\tilde{\rho}_{apres} = \frac{1}{2}\left(\mathrm{Id} + \vec{P}.\hat{\vec{\sigma}}\right)$.

2 Modèle simple de décohérence

(modèle proposé par Zureck (90'). Réf : cours d'Haroche sur le site du collège de France).

Introduction : Le modèle étudié dans cet exercice fait suite à l'exercice précédent. C'est un modèle dynamique qui traite l'état du spin (dans $\mathcal{H}_{spin}$) couplé à l'environnement (dans $\mathcal{H}_{env}$) et qui montre comment l'équation de Schrödinger (qui est unitaire) peut expliquer que la matrice densité réduite $\tilde{\rho}(t) = \mathrm{Tr}_{env}(\rho(t))$ du spin peut évoluer de façon irréversible vers l'état d'entropie maximale non polarisé :

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

Cette évolution d'un état initial pur vers un état non pur, s'appelle la **décohérence.** Elle est due au couplage du spin avec son environnement. En résolvant ce modèle on obtiendra de plus une expression pour le temps de décohérence $\tau_{decoh.}$ qui est le temps caractéristique de convergence vers cet état d'équilibre. Par rapport à l'exercice précédent, on peut penser

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

que le modèle présenté ici décrit l'évolution du système total dans la partie entre les points I et R (ou le faisceau est séparé spatialement et interagit avec l'environnement de façon différente selon qu'il est en A ou B).

L'espace total du système étudié est $\mathcal{H}_{tot} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathcal{H}_{env}$. L'état initial est

$$|\psi(0)\rangle = |S(0)\rangle \otimes |E(0)\rangle$$

avec

$$|S(0)\rangle = |+_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+_x\rangle + |-_x\rangle\right) \in \mathbb{C}^2, \quad |E(0)\rangle \in \mathcal{H}_{env}.$$

Le Hamiltonien total est

$$\hat{H} = \hat{S}_z \otimes \hat{H}_e, \qquad \hat{S}_z = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \text{ dans la base } |\pm_x\rangle$$

où $\hat{H}_e$ agit dans $\mathcal{H}_{env}$. Noter que l'on ne précise ni $|E(0)\rangle$, ni $\hat{H}_e$.

1. Écrire l'état total $|\psi(t)\rangle = e^{-it\hat{H}}|\psi(0)\rangle$ à l'instant t puis l'opérateur densité total $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$. Déduire l'expression de la matrice densité réduite de $\tilde{\rho} = \mathrm{Tr}_{env}(\rho(t))$ dans la base $|\pm_x\rangle$ en fonction de la fonction de "corrélation temporelle" de l'environnement $\langle E(0)|E(t)\rangle = \langle E(0)|e^{-it\hat{H}_e}|E(0)\rangle$.
2. On suppose maintenant que l'environnement est composé de N degrés de libertés indépendants mais identiques (penser N particules d'un gaz), chacun décrit par un espace quantique $\mathcal{H}$ et un opérateur Hamiltonien $\hat{H} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, c'est à dire que :

$$\mathcal{H}_{env} = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}}_{N}$$

et que

$$\hat{H}_{env} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i$$

où

$$\hat{H}_i = \mathrm{Id} \otimes \ldots \mathrm{Id} \otimes \underbrace{\hat{H}}_{position\, i} \otimes \mathrm{Id} \ldots \otimes \mathrm{Id}$$

agit dans l'espace de la particule i de l'environnement. L'état initial de l'environnement est un produit

$$|E(0)\rangle = |e(0)\rangle \otimes \ldots \otimes |e(0)\rangle, \qquad \|e(0)\| = 1.$$

Pour simplifier les calculs, on suppose que l'énergie moyenne de chaque particule est nulle : $\langle e(0)|\hat{H}|e(0)\rangle = 0$ et on note $\sigma^2 := \langle e(0)|\hat{H}^2|e(0)\rangle$ la variance (carré de l'incertitude en énergie). Montrer que à t fixé (quelconque) et pour $N \to \infty$, on a $\langle E(0)|E(t)\rangle = e^{-t^2\sigma^2/2}$ et déduire que la matrice densité réduite est donnée par

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

3. Donner l'expression de la matrice densité réduite $\tilde{\rho}(t)$ dans la base $|+_z\rangle = \frac{1}{2}(|+_x\rangle + |-_x\rangle)$, $|-_z\rangle = \frac{1}{2}(|+_x\rangle - |-_x\rangle)$ et comparer à la question (3-b) de l'exercice 1.
4. Déduire l'expression de l'entropie $S(\tilde{\rho}(t))$ (en particulier simplifier pour les limites $t \to 0$, $t \to \infty$) et tracer son allure en fonction de t. De même donner et tracer le vecteur polarisation $\vec{P}(t)$ du spin, défini par $\tilde{\rho}(t) = \frac{1}{2}\left(\mathrm{Id} + \vec{P}(t).\hat{\vec{\sigma}}\right)$. Déduire que le temps caractéristique de décohérence est donné par

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

5. Montrer plus généralement que les calculs précédents sont identiques (mais préciser les nouvelles expressions) si l'état initial total est donné par un opérateur densité $\rho(0) = (|S(0)\rangle\langle S(0)|) \otimes \rho_{env}$ avec

$$\rho_{env} = \rho_e \otimes \ldots \otimes \rho_e$$

tel que $\mathrm{Tr}\left(\hat{H}\rho_e\right) = 0$.

3 Entropie d'une distribution de Boltzmann

L'oscillateur harmonique quantique à une dimension a les niveaux d'énergie $E_i = \hbar\omega\left(i + \frac{1}{2}\right)$ avec $i \in \mathbb{N}$, et d'après la loi de Boltzmann, à l'équilibre thermique de température T, la probabilité pour que la particule soit au niveau i d'énergie E_i s'écrit :

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

en posant $\beta = \frac{\hbar\omega}{kT}$ et $\frac{1}{Z} = \frac{1}{Z'}e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}}$. 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 $\beta \to 0$ (haute température) et pour $\beta \to \infty$ (basse température).