

Chapter 3

Principes de la Mécanique Quantique

La physique moderne est fondée sur la Mécanique Quantique. Cette théorie a été élaborée suite à plusieurs expériences [p.ex: raies spectrales, corps noir, effet photoélectrique, effet Compton, diffraction des électrons sur les cristaux, physique atomique, expérience de Stern Gerlach etc...] et travaux des pères fondateurs [p.ex: Planck sur le corps noir 1900, Einstein sur le photon 1905, Bohr sur l'atome 1913, De Broglie sur la fonction d'onde 1924, Schroedinger sur l'évolution de la fonction d'onde 1926, Born sur l'interprétation de la fonction d'onde 1926, Heisenberg sur la formulation algébrique 1925, Dirac sur la mécanique quantique relativiste 1930, etc...]. Un bref aperçu de quelques-uns de ces sujets a été donné au premier chapitre.

En 1930 les grands principes physiques de la mécanique quantique étaient essentiellement connus. Leur formulation mathématique précise et un cadre cohérent fut donné par Dirac et von Neumann. Leurs livres “Principles of Quantum Mechanics” (Dirac 1930) et “Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik” (von Neumann 1932) jouèrent un rôle fondamental. Aujourd'hui même, les grands principes sont inchangés, et combinés avec les principes de la relativité décrivent avec un succès une gamme impressionnante de phénomènes sur les échelles de distances, d'énergies et de températures associées à la physique de la matière condensée, atomique et moléculaire, nucléaire, sub-nucléaire. Malheureusement on ne sait toujours pas combiner de façon cohérente la théorie classique de la gravitation avec la mécanique quantique, et dans ce domaine il n'existe aussi pas d'expériences pouvant guider les physiciens (car la force de gravité est en fait très faible).

Le cadre général de la MQ est l'espace de Hilbert. L'espace de Hilbert est essentiellement un espace vectoriel sur le corps des nombres complexes muni d'un produit scalaire. Nous allons donc commencer par donner quelques rap-

pels d'algèbre linéaire sur ces espaces. En même temps ceci est l'occasion d'introduire la notation de Dirac des "bras" et "kets" de façon un peu plus formelle. Ensuite nous formulons 5 postulats qui ensemble forment les grands principes de la MQ.

3.1 Algèbre linéaire en notation de Dirac

Un espace de Hilbert \mathcal{H} est un espace vectoriel sur le corps \mathbf{C} , muni d'un produit scalaire. Pour un espace de dimension fini cette définition est suffisante. Pour des espaces de dimension infinie il faut préciser des conditions qui permettent de prendre des limites; mais dans le cadre de ce cours nous resterons en dimension finie comme cela est le plus souvent le cas en information quantique.

Les vecteurs sont notés $|\psi\rangle$ (prononcé "ket psi"). L'hermitien conjugué (transposé et complexe conjugué) est noté $\langle\psi|$ (prononcé "bra psi"). Le produit scalaire est noté $\langle\phi|\psi\rangle$. C'est le produit scalaire entre les vecteurs $|\phi\rangle$ et $|\psi\rangle$. On appelle aussi $\langle\phi|\psi\rangle$ un "bracket". Le produit scalaire satisfait à:

1. *Positivité*: $\langle\phi|\phi\rangle \geq 0$ avec égalité si et seulement si $|\phi\rangle = 0$.
2. *Linearité*: $\langle\phi|(\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle) = \alpha\langle\phi|\psi_1\rangle + \beta\langle\phi|\psi_2\rangle$, $\alpha, \beta \in \mathbf{C}$
3. *Symétrie*: $\langle\phi|\psi\rangle = \overline{\langle\psi|\phi\rangle}$ ou la barre dénote la conjugaison complexe.

Exemple 1: Bit quantique ou système à deux niveaux. $\mathcal{H} = \mathbf{C}^2 = \left\{ \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \text{ with } \alpha, \beta \in \mathbf{C} \right\}$. Le produit scalaire est $(\bar{\gamma}, \bar{\delta}) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \bar{\gamma}\alpha + \bar{\delta}\beta$. En notation de Dirac

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

où $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. De plus

$$(\bar{\gamma}, \bar{\delta}) = \bar{\gamma}\langle 0| + \bar{\delta}\langle 1|$$

et

$$(\bar{\gamma}\langle 0| + \bar{\delta}\langle 1|)(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = \bar{\gamma}\alpha\langle 0|0\rangle + \bar{\gamma}\beta\langle 0|1\rangle + \bar{\delta}\alpha\langle 1|0\rangle + \bar{\delta}\beta\langle 1|1\rangle = \bar{\gamma}\alpha + \bar{\delta}\beta$$

Exemple 2: particule dans l'espace à trois dimensions. $\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R}^3) = \{f : \mathbf{R}^3 \rightarrow \mathbf{C}, \int d^3\vec{x}|f(\vec{x})|^2 < \infty\}$. Le produit scalaire $\langle f|g\rangle = \int d^3\vec{x}\overline{f(\vec{x})}g(\vec{x})$

et la norme induite $\|f\|_2 = \langle f|f \rangle^{1/2} = \int d^3\vec{x} |f(\vec{x})|^2$. Cet espace joue un rôle fondamental en MQ mais nous n'en parlerons quasiment plus dans ce cours car nous nous occuperons uniquement de degrés de liberté discrets.

Nous aurons besoin de la notion de produit tensoriel. Soit \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}_2 deux espaces de Hilbert avec deux bases finies. Soit $|i\rangle_1$, $i = 1, \dots, n_1$ la première base de $\dim \mathcal{H}_1 = n_1$ et $|j\rangle_2$, $j = 1, \dots, n_2$ celle de $\dim \mathcal{H}_2 = n_2$. Nous pouvons former "l'espace produit"

$$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$$

qui est simplement le nouvel espace de Hilbert engendré par la base des vecteurs

$$|i\rangle_1 \otimes |j\rangle_2$$

(aussi notés $|i, j\rangle$ or $|i\rangle_1 |j\rangle_2$). Il y a $n_1 n_2$ vecteurs dans cette base, donc

$$\dim \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = n_1 n_2$$

Un vecteur général de l'espace produit est

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} c_{ij} |i, j\rangle = \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} c_{ij} |i\rangle_1 \otimes |j\rangle_2$$

Le produit scalaire dans l'espace produit est par définition:

$$\langle i', j' | i, j \rangle = (\langle i' |_1 \otimes \langle j' |_2) (|i\rangle_1 \otimes |j\rangle_2) = \langle i' | i \rangle_1 \langle j' | j \rangle_2$$

.

Exemple 3. Pour un bit quantique l'espace de Hilbert est \mathbf{C}^2 . Nous verrons que l'espace de Hilbert de deux bits quantiques est $\mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2$. Les vecteurs de base de $\mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2$ sont $\{|0\rangle \otimes |0\rangle, |0\rangle \otimes |1\rangle, |1\rangle \otimes |0\rangle, |1\rangle \otimes |1\rangle\}$ ou bien $\{|0, 0\rangle, |0, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, 1\rangle\}$. Un état général est

$$|\psi\rangle = \alpha_{00}|0, 0\rangle + \alpha_{01}|0, 1\rangle + \alpha_{10}|1, 0\rangle + \alpha_{11}|1, 1\rangle$$

On a $\dim \mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2 = 4$ et bien sûr $\mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2$ est isomorphe à \mathbf{C}^4 . Voici quelques exemples de produits scalaires: $\langle 0, 0 | 0, 0 \rangle = \langle 0 | 0 \rangle \langle 0 | 0 \rangle = 1$, $\langle 0, 1 | 0, 1 \rangle = \langle 0 | 0 \rangle \langle 1 | 1 \rangle = 1$, $\langle 0, 1 | 1, 1 \rangle = \langle 0 | 1 \rangle \langle 1 | 1 \rangle = 0$ etc... A partir de là on peut calculer le produit scalaire de $|\psi\rangle$ and $|\phi\rangle = \underline{\beta}_{00}|0, 0\rangle + \underline{\beta}_{01}|0, 1\rangle + \underline{\beta}_{10}|1, 0\rangle + \underline{\beta}_{11}|1, 1\rangle$. On trouve comme attendu $\langle \phi | \psi \rangle = \underline{\beta}_{00}\alpha_{00} + \underline{\beta}_{01}\alpha_{01} + \underline{\beta}_{10}\alpha_{10} + \underline{\beta}_{11}\alpha_{11}$. Il peut être utile de travailler dans une base canonique de \mathbf{C}^4

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |0, 0\rangle \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |0, 1\rangle \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |1, 0\rangle \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |1, 1\rangle$$

Une fois cette correspondance (conventionnelle) fixée on peut inférer les règles du produit tensoriel en composantes:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Ces règles se généralisent à $\mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2$ etc...

Inégalités de Cauchy-Schwarz. Comme d'habitude:

$$|\langle \phi | \psi \rangle| \leq \langle \phi | \phi \rangle^{1/2} \langle \psi | \psi \rangle^{1/2}$$

Relation de Fermeture. Soit $|i\rangle$, $i = 1, \dots, n$ une base orthonormée d'un espace de Hilbert à n -dimensions. Un vecteur peut être développé

$$|\phi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |i\rangle, \quad c_i = \langle i | \phi \rangle$$

Les composantes c_i sont obtenues en projetant $|\phi\rangle$ sur les vecteurs de base. Le développement devient

$$|\phi\rangle = \sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i | \phi \rangle$$

Notez que $|i\rangle \langle i|$ la (matrice du) projecteur sur $|i\rangle$. On peut penser à $\sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i|$ comme à la matrice identité agissant sur $|\phi\rangle$. On obtient donc la *relation de fermeture*

$$\sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i| = I$$

Observables. En MQ les observables (“quantités mesurables”) sont représentées par des matrices hermitiennes agissant sur \mathcal{H} . Rappelons quelques propriétés importantes.

L'application $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, $|\psi\rangle \rightarrow A|\psi\rangle$ est linéaire si

$$A(\alpha|\phi_1\rangle + \beta|\phi_2\rangle) = \alpha(A|\phi_1\rangle) + \beta(A|\phi_2\rangle)$$

une application linéaire peut être représentée par une matrice aussi notée A .

Les éléments de matrice de A dans la base orthonormée $\{|i\rangle, i = 1, \dots, n\}$ de \mathcal{H} sont notés $\langle i|A|j\rangle$ or A_{ij} . Etant donné A , l'adjoint de A est noté A^\dagger et défini par

$$\langle \phi|A^\dagger|\psi\rangle = \overline{\langle \psi|A|\phi\rangle}$$

Donc l'adjoint (où l'hermitien conjugué) est l'application linéaire avec la matrice transposée et complexe conjuguée. On a pour les éléments de matrice

$$\langle i|A^\dagger|j\rangle = \overline{\langle j|A|i\rangle}, \quad (A^\dagger)_{ij} = \overline{A_{ij}}$$

On dit que A est hermitienne si $A = A^\dagger$. On peut vérifier que $(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$ and $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$.

On définit aussi le *commutateur*

$$[A, B] = AB - BA$$

et l'anticommutateur

$$\{A, B\} = AB + BA$$

Projecteurs en notation de Dirac. L'opération linéaire

$$|i\rangle\langle i| = P_i$$

est un projecteur sur le vecteur de base $|i\rangle$. Si P_i est un projecteur, on a $P_i^\dagger = P_i$ et $P_i^2 = P_i$. Voici comment on peut le vérifier en notation de Dirac:

$$P_i^\dagger = (|i\rangle\langle i|)^\dagger = (\langle i|)^\dagger(|i\rangle)^\dagger = |i\rangle\langle i| = P_i$$

$$P_i^2 = (|i\rangle\langle i|)(|i\rangle\langle i|) = |i\rangle\langle i|i\rangle\langle i| = |i\rangle\langle i| = P_i$$

Puisque $|i\rangle$ and $|j\rangle$ sont orthogonaux pour $i \neq j$ on a $P_i P_j = P_j P_i = 0$. En effet

$$P_i P_j (|i\rangle\langle i|)(|j\rangle\langle j|) = |i\rangle\langle i|j\rangle\langle j| = 0$$

$$P_j P_i (|j\rangle\langle j|)(|i\rangle\langle i|) = |j\rangle\langle j|i\rangle\langle i| = 0$$

Si $|\phi\rangle$ est n'importe quel vecteur sur l'espace de Hilbert, alors $P_\phi = |\phi\rangle\langle\phi|$ est le projecteur sur $|\phi\rangle$.

Décomposition Spectrale. Les matrices hermitiennes sur l'espace de Hilbert ont une *décomposition spectrale*,

$$A = \sum_n a_n P_n$$

où $a_n \in \mathbf{R}$ sont les valeurs propres et P_n les projecteurs propres de A . Dans le cas non-dégénéré on a

$$P_n = |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$$

où $|\phi_n\rangle$ est le vecteur propre associé à la valeur propre a_n :

$$A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle$$

Les vecteurs propres et projecteurs associés à des valeurs propres différentes sont orthogonaux. De plus ils satisfont à la relation de fermeture

$$I = \sum_n P_n = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$$

Nous écrirons souvent la décomposition spectrale sous la forme

$$A = \sum_n a_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$$

3.2 Principes de la mécanique quantique

Dans ce paragraphe nous expliquons les 5 grands principes de la MQ:

- les systèmes isolés sont décrits par *des vecteurs (kets) states d'un espace de Hilbert*,
- le vecteur d'état *évolue dans le temps de façon unitaire*,
- les *observables* sont décrites par des *matrices hermitiennes*,
- l'opération de mesure est un processus distinct de l'évolution temporelle: c'est une *projection aléatoire*,
- on peut *composer* des systèmes: leur espace d'Hilbert est un espace produit (tensoriel).

Principe 1: vecteurs détats. L'état dun système - isolé du reste de l'univers - est *completement* spécifié par un vecteur de l'espace de Hilbert. Le vecteur $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ doit être normalisé $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

Exemple 4.

- La polarisation du photon est décrite par $\mathcal{H} = \mathbf{C}^2$. Les vecteurs détats de \mathbf{C}^2 sont $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Un état de polarisation

linéaire $|\theta\rangle = \cos\theta|0\rangle + \sin\theta|1\rangle$, un état de polarisation circulaire $|\tilde{\theta}\rangle = \cos\theta|0\rangle + i\sin\theta|1\rangle$, et un état général

$$\cos\theta|0\rangle + e^{i\delta}\sin\theta|1\rangle$$

- Le spin $\frac{1}{2}$ (de l'électron par exemple) est décrit par le même espace d'Hilbert. La paramétrisation naturelle est

$$\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\delta}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$$

La sphère de Bloch est une représentation géométrique naturelle de l'espace de Hilbert de ces états.

- Pour une particule dans \mathbf{R}^3 on a $\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R}^3)$. Les vecteurs d'états sont les fonctions d'ondes normalisées $\int d^3\vec{x}|\psi(\vec{x})|^2 = 1$.

Principe 2: évolution temporelle. Un système isolé évolue (au cours du temps) de façon unitaire. Cela signifie que si $|\psi\rangle$ est l'état au temps 0, l'état au temps t est de la forme $U_t|\psi\rangle$ où U_t est une matrice unitaire de $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Ici unitaire signifie que $U_t^\dagger U_t = U_t U_t^\dagger = 1$ ou bien de façon équivalente $U_t^{-1} = U_t^\dagger$.

L'évolution unitaire forme un groupe (ou plutôt la représentation du groupe des translations temporelles) au sens suivant:

$$U_{t=0} = I, \quad U_{t_1} U_{t_2} = U_{t_1+t_2}$$

La MQ nous indique comment calculer U_t pour un système donné: il faut résoudre l'équation de *Schroedinger*. En information quantique nous ne nous intéressons pas (en général) à cette équation. On suppose (de façon optimiste) qu'un ingénieur ou un physicien saura construire un appareil (appelé circuit quantique) qui réalise l'opération unitaire U_t voulue. L'opération voulue sera spécifiée par l'algorithme quantique. Nous reviendrons sur ce point plus tard dans le cours.

Example 5. Un miroir semi-transparent décompose un rayon incident en rayon réfléchi et rayon transmis. Soit $\mathcal{H} = \mathbf{C}^2$ l'espace de Hilbert avec la base $|T\rangle, |R\rangle$. Le miroir semi-transparent agit de façon unitaire

$$|T\rangle \rightarrow \boxed{\text{H}} \rightarrow H|T\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|T\rangle + |R\rangle)$$

$$|R\rangle \rightarrow \boxed{\text{H}} \rightarrow H|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|T\rangle - |R\rangle)$$

La matrice unitaire H s'appelle matrice de Hadamard ou "porte logique de Hadamard"

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Principe 3: quantités observables. En mécanique quantique une quantité observable (énergie, moment magnétique moment, position, impulsion, vitesse,...) est représentée par une matrice hermitienne.

Il n'est pas forcément évident de savoir comment choisir la matrice (ou opérateur). Il existe un "principe de correspondance" (voir chap 1, compléments) qui est une sorte de règle pratique pour construire l'opérateur à partir de la quantité classique. En fait cette règle est parfois ambiguë car les matrices sont des objets qui ne commutent pas. D'autrepart il existe des observables (comme le spin qui n'ont pas d'analogie classique).

Exemple 6.

- Position x , impulsion $p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, énergie ou Hamiltonien $\frac{p^2}{2m} + V(x)$. dans ce cours nous n'aurons pas besoin de ces observables.
- Polarisation du photon. On envoie un photon à travers une lame biréfringente (voir chapitre 1). Si D_y clique on enregistre -1 alors que si D_x clique on enregistre $+1$. Les observations sont décrites par l'observable

$$\mathcal{P} = (+1)|x\rangle\langle x| + (-1)|y\rangle\langle y|$$

cette observable est la matrice hermitienne $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ (dans la base $|x\rangle, |y\rangle$).

- Toute observable (matrice hermitienne) de $\mathcal{H} = \mathbf{C}^2$ peut être représentée par une matrice 2×2

$$A = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \bar{\beta} & \gamma \end{pmatrix}$$

ou en notation de Dirac

$$A = \alpha|0\rangle\langle 0| + \beta|0\rangle\langle 1| + \bar{\beta}|1\rangle\langle 0| + \gamma|1\rangle\langle 1|$$

Toutes ces matrices peuvent être représentées par une combinaison linéaire des matrices (exercices)

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

Les matrices hermitiennes X, Y, Z sont appelées les matrices de Pauli.

Les matrices de Pauli servent entre autres à décrire le spin $\frac{1}{2}$: il s'agit d'un vecteur à 3 composants $\Sigma = (X, Y, Z)$. Dans la littérature physique $\Sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. Les propriétés importantes de ces matrices sont (exercices)

$$X^2 = Y^2 = Z^2 = I, \quad XY = -YX, \quad XZ = -ZX, \quad YZ = -ZY$$

et

$$[X, Y] = 2iZ, \quad [Y, Z] = 2iX, \quad [Z, X] = 2iY$$

Principe 4: postulat de la mesure. Soit un système préparé dans l'état $|\psi\rangle$. On veut mesurer une observable du système grâce à un appareil. L'appareil est modélisé par un ensemble de projecteur orthogonaux $\{P_n\}$ satisfaisant $\sum_n P_n = I$. Une mesure *projetée*¹ l'état ψ du système qui devient juste après la mesure

$$|\phi_n\rangle = \frac{P_n|\psi\rangle}{\|P_n|\psi\rangle\|} = \frac{P_n|\psi\rangle}{\langle\psi|P_n|\psi\rangle^{1/2}}$$

Pour une mesure unique *il n'y a pas moyen de prédire* l'état résultant $|\phi_n\rangle$: celui-ci est aléatoire. Si l'expérience de mesure est répétée plusieurs fois la probabilité (interprétation fréquentiste de la probabilité) d'observer n est

$$\text{Prob}(\text{resultat } n) = |\langle\phi_n|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|P_n|\psi\rangle$$

Remarque 1. Puisque $\sum_j P_j = I$ et $|\psi\rangle$ sont normalisés on a

$$\sum_j \text{Prob}(\text{resultat } j) = 1$$

Remarque 2. Avec $P_j = |j\rangle\langle j|$ la probabilité de l'état résultant j est

$$\text{Prob}(\text{resultat } j) = \langle\psi|P_j|\psi\rangle = |\langle j|\psi\rangle|^2$$

et l'état juste après la mesure est $|j\rangle$.

Conséquence importante concernant la mesure des observables. Ce point est fondamental car ce sont les observables que l'on mesure dans une expérience. L'appareil de mesure modélisé par un ensemble de projecteurs

¹les physiciens disent que l'état ou la fonction d'onde est "réduit(e)"

$\{P_n\}$ permet de mesurer toutes les observables de la forme $A = \sum_j a_j P_j$. Une mesure donne $|\psi\rangle \rightarrow |\phi_n\rangle$ pour un certain n . Puisque $A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle$, la valeur de A donnée par la mesure est précisément a_n .

La valeur moyenne des mesures de A si l'état du système est $|\psi\rangle$

$$\sum_j a_j \langle \psi | P_j | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

et la variance

$$\sum_j a_j^2 \langle \psi | P_j | \psi \rangle - \left(\sum_j a_j \langle \psi | P_j | \psi \rangle \right)^2 = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle - \langle \psi | A | \psi \rangle^2$$

En pratique on utilise le membre de droite de ces formules pour calculer les valeurs moyennes et variances.

Après une mesure le vecteur d'état est réduit à $|\psi\rangle \rightarrow |\phi_n\rangle$, pour un certain n , et la valeur moyenne dans le nouvel état (i.e $|\phi_n\rangle$) devient a_n , et la variance devient nulle.

De plus on ne peut mesurer avec le même appareil que des observables ayant les mêmes projecteurs propres. En particulier la mesure simultanée (avec un même appareil) n'a de sens que si les observables ont les même projecteurs et vecteurs propres. Elles peuvent avoir des valeurs propres différentes mais doivent commuter. Nous reviendrons sur ce point lorsque nous formulerons l'inégalité de Heisenberg.

Exemple 7: mesure de polarisation du photon. Pour mesurer l'observable

$$\mathcal{P} = |x\rangle\langle x| - |y\rangle\langle y|$$

on utilise l'appareil constitué d'un analyseur orienté le long de x et un détecteur. Cet appareil est la réalisation physique de la base de mesure $\{|x\rangle, |y\rangle\}$. Si le photon traverse l'analyseur l'état juste après la mesure est $|x\rangle$, et si le photon est absorbé l'état juste après la mesure est $|y\rangle$. Les probabilités associées sont

$$\text{Prob}(\text{resultat } +1) = |\langle x | \psi \rangle|^2, \quad \text{Prob}(\text{resultat } -1) = |\langle y | \psi \rangle|^2$$

Si la préparation initiale de la polarisation des photons est $|\psi\rangle = \cos\theta|x\rangle + \sin\theta|y\rangle$ ces probabilités sont simplement $\cos^2\theta$ et $\sin^2\theta$. Supposons que l'analyseur soit tourné d'un angle γ . cela signifie que l'on mesure l'observable

$$\mathcal{P} = |\gamma\rangle\langle\gamma| - |\gamma_\perp\rangle\langle\gamma_\perp|$$

Les probabilités associée à cette mesure sont

$$\text{Prob}(\text{resultat } +1) = |\langle \gamma | \psi \rangle|^2 = \cos^2(\theta - \gamma)$$

$$\text{Prob}(\text{resultat} = -1) = |\langle \gamma_{\perp} | \psi \rangle|^2 = \sin^2(\theta - \gamma)$$

Finalement notons que dans le premier cas l'observable mesurée est la matrice

$$\mathcal{P} = Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

et dans le second cas

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} \cos 2\gamma & \sin 2\gamma \\ \sin 2\gamma & -\cos 2\gamma \end{pmatrix} = (\cos 2\gamma)Z + (\sin 2\gamma)X$$

Principe d'incertitude Prenons un système dans l'état $|\psi\rangle$ et considérons deux observables A et B . Elles ont chacune une représentation spectrale

$$A = \sum_j a_j P_j, \quad B = \sum_j b_j Q_j$$

Comme expliqué précédemment dans l'état $|\psi\rangle$, chaque observable possède la valeur moyenne $\langle \psi | A | \psi \rangle$, $\langle \psi | B | \psi \rangle$ et l'écart type $\Delta A = \sqrt{\langle \psi | A^2 | \psi \rangle - \langle \psi | A | \psi \rangle^2}$, $\Delta B = \sqrt{\langle \psi | B^2 | \psi \rangle - \langle \psi | B | \psi \rangle^2}$. La relation ou inégalité d'incertitude de Heisenberg stipule

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \langle \psi | [A, B] | \psi \rangle$$

L'interprétation de cette inégalité est la suivante. Si $[A, B] \neq 0$ il n'est pas possible de mesurer A et B simultanément avec précision infinie. Si $\Delta A = 0$ alors $\Delta B = \infty$. L'exemple le plus frappant est $A = x$ (position) and $B = p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ (impulsion ou quantité de mouvement). dans ce cas $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{4\pi}$ et on ne peut pas mesurer avec précision infinie position et impulsion de la particule: ce n'est pas une limitation technologique mais une limitation imposée par les lois de la nature.

Si $[A, B] = 0$ il existe une base commune de l'espace de Hilbert dans laquelle A et B sont toutes deux diagonales. En mesurant dans cette base, le postulat de la mesure indique que les observables peuvent être mesurées avec précision infinie. Il n'y a pas de contradiction avec le principe d'incertitude car le membre de droite de l'inégalité de Heisenberg s'annule quand $[A, B] = 0$.

Principe 5: systèmes quantiques composés. Prenons deux systèmes \mathcal{A} et \mathcal{B} avec espaces de Hilbert $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ and $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$. L'espace de Hilbert du système composé \mathcal{AB} est donné par le produit tensoriel

$$\mathcal{H}_{\mathcal{A}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{B}}$$

Les états de \mathcal{AB} sont les vecteurs $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Les postulats précédents s'appliquent aux systèmes composés.

Ce postulat est en fait non trivial et nous étudierons quelques conséquences. En particulier Einstein, Podolsky et Rosen ainsi que Schroedinger furent les premiers à analyser la signification de ce postulat. Ces études menèrent aux inégalités de Bell, à la téléportation et au dense coding qui jouent aujourd'hui un rôle important en information quantique.

Example 8. Deux photons avec degrés de liberté de polarisation ou deux bits quantiques. L'espace de Hilbert est $\mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2$. Exemples d'états $|x\rangle_A \otimes |y\rangle_B$ ou $|x\rangle_A \otimes |y\rangle_B + |\theta\rangle_A \otimes |\theta\rangle_B$. N bits quantiques possèdent l'espace de Hilbert

$$\underbrace{\mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2 \otimes \dots \otimes \mathbf{C}^2}_{N \text{ copies}}$$

Si $|0\rangle, |1\rangle$ est une base pour \mathbf{C}^2 , une base du système composé est donnée par

$$|b_1\rangle \otimes |b_2\rangle \dots \otimes |b_N\rangle = |b_1, \dots, b_N\rangle$$

où $b_i = \{0, 1\}$. Il y a 2^N états de base en correspondance avec 2^N suites de longueur N de bits classiques. Un état de N bits quantiques est une superposition des états de base:

$$|\psi\rangle = \sum_{b_1, \dots, b_N} c_{b_1, \dots, b_N} |b_1, \dots, b_N\rangle$$

ou les coefficients $c_{b_1 \dots b_N}$ satisfont

$$\sum_{b_1, \dots, b_N} |c_{b_1, \dots, b_N}|^2 = 1$$

3.3 États produit et état intriqués

Les états d'un système composé \mathcal{AB} appartiennent à $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Un état est de type produit si il peut être représenté comme

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B$$

Un état intriqué $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ est un état pour lequel il est impossible de trouver $|\phi\rangle_A \in \mathcal{H}_A$ et $|\phi\rangle_B \in \mathcal{H}_B$ telle que ψ soit de la forme produit.

Les états intriqués engendrent des corrélations très spéciales entre les parties \mathcal{A} et \mathcal{B} . Nous verrons que ces corrélations n'ont aucune contrepartie classique (et jouent un rôle important dans la téléportation par exemple).

Exemple 9. Deux bits quantiques avec $\mathcal{A} \otimes \mathcal{B} = \mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2$. Quelques états produit : $|0\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |0\rangle_{\mathcal{B}} = |0, 0\rangle$, $|0\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |1\rangle_{\mathcal{B}} = |0, 1\rangle$, $|1\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |0\rangle_{\mathcal{B}} = |1, 0\rangle$, $|1\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |1\rangle_{\mathcal{B}} = |1, 1\rangle$. Des états produits moins évidents

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_{\mathcal{A}} + |1\rangle_{\mathcal{B}}) \otimes |0\rangle_{\mathcal{B}} = \frac{1}{2}(|0, 0\rangle + |1, 0\rangle)$$

et

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_{\mathcal{A}} + |1\rangle_{\mathcal{B}}) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_{\mathcal{B}} - |1\rangle_{\mathcal{B}}) = \frac{1}{2}(|0, 0\rangle - |0, 1\rangle + |1, 0\rangle - |1, 1\rangle)$$

Il existe des états intriqués qui ne peuvent pas se mettre sous forme produit. Par exemple,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |0\rangle_{\mathcal{B}} + |1\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |1\rangle_{\mathcal{B}}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 0\rangle + |1, 1\rangle)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |0\rangle_{\mathcal{B}} - |1\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |1\rangle_{\mathcal{B}}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 0\rangle - |1, 1\rangle)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |0\rangle_{\mathcal{B}} + |0\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |1\rangle_{\mathcal{B}}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0\rangle + |0, 1\rangle)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |0\rangle_{\mathcal{B}} - |1\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |0\rangle_{\mathcal{B}}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 1\rangle + |1, 0\rangle)$$

Ces quatres états jouent un rôle particulier et s'appellent états de Bell.

Production d'états intriqués. Soit un système composé avec état initial $|\phi\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |\chi\rangle_{\mathcal{B}}$. Ce pourrait être par exemple deux électrons dans l'état de spin $|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$. Si on les laisse évoluer séparément sans interaction, l'opérateur évolution unitaire est de la forme $U_{\mathcal{A}} \otimes U_{\mathcal{B}}$ et

$$U_{\mathcal{A}} \otimes U_{\mathcal{B}}(|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle) = U_{\mathcal{A}}|\uparrow\rangle \otimes U_{\mathcal{B}}|\downarrow\rangle$$

si bien que l'état reste dans un état produit.

Pour produire des états intriqués \mathcal{A} and \mathcal{B} doivent interagir pendant l'évolution temporelle, pour que $U_{\mathcal{AB}} \neq U_{\mathcal{A}} \otimes U_{\mathcal{B}}$. Toutes les interactions physiques connues sont locales dans l'espace et le temps: deux systèmes dans un état intriqué ont nécessairement été en contact dans le passé.

3.4 Impossibilité de “cloner” un état quantique

Les bits classiques peuvent être copiés. Par exemple un texte peut être dupliqué ou copié avec une machine à photocopier “universelle”: la même machine peut copier tous les textes.

Soit un ensemble d'états quantiques $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ et supposons que nous voulions construire une “machine universelle” qui “copie” tout $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. cette machine quantique devrait être décrite par un opérateur ou matrice unitaire U (ceci est vrai pour tout processus physique sauf pour celui de la mesure). L'espace d'Hilbert est $\mathcal{H}_{\mathcal{A}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{B}}$ ou \mathcal{A} est l'espace des états que l'on désire copier et \mathcal{B} celui des copies. On commence par l'état initial

$$|\psi\rangle \otimes |\text{blank}\rangle$$

La machine produit la sortie:

$$|\psi\rangle \otimes |\text{blank}\rangle \rightarrow \boxed{U} \rightarrow |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle$$

En termes mathématiques la question est: peut-on trouver un opérateur unitaire tel que pour un ensemble raisonnablement large d'états ψ

$$U(|\psi\rangle \otimes |\text{blank}\rangle) = |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle$$

La réponse est non. Ce fait s'appelle parfois le “no cloning theorem”. Par contre il est possible de cloner/copier un ensemble d'états orthogonaux avec un U approprié (qui dépend de l'ensemble spécifique en question).

Preuve du théorème de non-clonage. Supposons qu'il existe U tel que $U^\dagger U = U U^\dagger = 1$ avec

$$U(|\phi_1\rangle \otimes |\text{blank}\rangle) = |\phi_1\rangle \otimes |\phi_1\rangle$$

$$U(|\phi_2\rangle \otimes |\text{blank}\rangle) = |\phi_2\rangle \otimes |\phi_2\rangle$$

En prenant l'hermitien conjugué de la deuxième équation

$$(\langle\phi_2| \otimes \langle\text{blank}|)U^\dagger = \langle\phi_2| \otimes \langle\phi_2|$$

En prenant le produit scalaire avec la première équation

$$\langle\phi_2| \otimes \langle\text{blank}|U^\dagger U|\phi_1\rangle \otimes |\text{blank}\rangle = (\langle\phi_2| \otimes \langle\phi_2|)(|\phi_1\rangle \otimes |\phi_1\rangle)$$

ce qui implique

$$\langle\phi_2|\phi_1\rangle\langle\text{blank}|\text{blank}\rangle = \langle\phi_2|\phi_1\rangle^2$$

donc

$$\langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = 0 \text{ or } \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = 1$$

Nous concluons qu'il n'est pas possible de copier $|\phi_1\rangle$ and $|\phi_2\rangle$ qui ne sont pas identiques ou bien pas orthogonaux, avec le même U . En fait il est possible de copier une base orthogonale ou des états orthogonaux.

Les états non-orthogonaux ne peuvent pas être parfaitement distingués.

Il existe plusieurs variantes et raffinements du no-cloning theorem. Ici nous discutons une de ces variantes. Donnons nous deux états $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ et essayons de construire une machine (unitaire) qui permet de les distinguer. Mathématiquement on cherche une matrice unitaire U telle que

$$U|\psi\rangle \otimes |a\rangle = |\psi\rangle \otimes |v\rangle$$

$$U|\phi\rangle \otimes |a\rangle = |\phi\rangle \otimes |v'\rangle$$

où les sorties $|v\rangle$ et $|v'\rangle$ sont différents. Le produit scalaire entre ces deux équations donne

$$\langle \phi | \otimes \langle a | U^\dagger U | \psi \rangle \otimes | a \rangle = (\langle \phi | \otimes \langle v' |) (| \psi \rangle \otimes | v \rangle)$$

ceci implique

$$\langle \phi | \psi \rangle \langle a | a \rangle = \langle \phi | \psi \rangle \langle v' | v \rangle$$

Si $|\phi\rangle$ n'est pas orthogonal à $|\psi\rangle$ nous avons $\langle \phi | \psi \rangle \neq 0$ donc

$$\langle v' | v \rangle = \langle a | a \rangle = 1$$

Ainsi $|v\rangle = |v'\rangle$ et il n'y a pas d'information dans $|v\rangle$ et $|v'\rangle$ qui permet de distinguer $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$.