

### Université Libre de Bruxelles

### Synthèse

# Mécanique quantique II PHYS-H-401

Auteur:

Nicolas Englebert

Professeur : Nicolas Cerf



## Appel à contribution

### Synthèse Open Source



Ce document est grandement inspiré de l'excellent cours donné par Nicolas CERF à l'EPB (École Polytechnique de Bruxelles), faculté de l'ULB (Université Libre de Bruxelles). Il est écrit par les auteurs susnommés avec l'aide de tous les autres étudiants et votre aide est la bienvenue! En effet, il y a toujours moyen de l'améliorer surtout

que si le cours change, la synthèse doit être changée en conséquence. On peut retrouver le code source à l'adresse suivante

https://github.com/nenglebert/Syntheses

Pour contribuer à cette synthèse, il vous suffira de créer un compte sur *Github.com*. De légères modifications (petites coquilles, orthographe, ...) peuvent directement être faites sur le site! Vous avez vu une petite faute? Si oui, la corriger de cette façon ne prendra que quelques secondes, une bonne raison de le faire!

Pour de plus longues modifications, il est intéressant de disposer des fichiers : il vous faudra pour cela installer LAT<sub>E</sub>X, mais aussi *git*. Si cela pose problème, nous sommes évidemment ouverts à des contributeurs envoyant leur changement par mail ou n'importe quel autre moyen.

Le lien donné ci-dessus contient aussi un README contenant de plus amples informations, vous êtes invités à le lire si vous voulez faire avancer ce projet!

#### Licence Creative Commons

Le contenu de ce document est sous la licence Creative Commons : Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International (CC BY-NC-SA 4.0). Celle-ci vous autorise à l'exploiter pleinement, compte- tenu de trois choses :



- 1. Attribution; si vous utilisez/modifiez ce document vous devez signaler le(s) nom(s) de(s) auteur(s).
- 2. Non Commercial; interdiction de tirer un profit commercial de l'œuvre sans autorisation de l'auteur
- 3. Share alike; partage de l'œuvre, avec obligation de rediffuser selon la même licence ou une licence similaire

Si vous voulez en savoir plus sur cette licence :

http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/

Merci!

# Table des matières

1	Opé	érateur densité	1
	1.1	Introduction	1
		1.1.1 Distinction entre superposition quantique et mélange statistique	1
	1.2	Opérateur densité d'un état pur	2
		1.2.1 Trace, propriété de $\rho$ , Liouville quantique, mesure de l'état $\rho$	3
	1.3	Opérateur densité d'un mélange statistique	6
		1.3.1 Définition, propriétés de $\hat{\rho}$ , interprétation (diagonalisation)	6
	1.4	Distribution de Wigner	8
		1.4.1 Définition, propriétés de $W(x,p)$ , négativité de $W(x,p)$	8

### Chapitre 1

# Opérateur densité

### 1.1 Introduction

### 1.1.1 Distinction entre superposition quantique et mélange statistique

L'opérateur densité peut être vu comme une généralisation du vecteur d'état. En effet, pour décrire un système plus compliqué, on utilise la mécanique statistique : on considère un système d'axes (x,p) que l'on peut subdiviser en plusieurs cases dx dp. On peut alors introduire f(x,p) dx dp comme étant la probabilité de trouver la particules dans dx dp. Avant de nous intéresser à distribution f(x,p), il est nécessaire d'introduire un nouveau formalisme.

Le problème est que nous ne savons pas où est une particule et on aimerait associer la notion de probabilité à un formalisme quantique

$$|\psi\rangle = \int dx \; \psi(\vec{r}) \, |\vec{r}\rangle$$
 (1.1)

Nous ne savons pas exactement dans quel état nous nous sommes : les probabilités reflètent ainsi le manque connaissance de la position et l'impulsion.

Définissons la notion d'**état pure**. Tous les états considérés jusqu'ici étaient considérés comme tel. Il s'agit d'un état qui peut être décrit à partir des vecteurs propres d'un ECOC. Mais il se peut que l'on n'ai pas toujours la parfaite connaissance d'un observable de notre ECOC : nous avons ainsi un manque de connaissance qui se traduit par un **état mixte**.

La nécessite d'introduire la notion d'état mixte se justifie expérimentalement : l'expérience de Stern et Gerlach ne peut être comprise si cette notion n'est pas introduite.

#### Expérience de Stern et Gerlach

Cette expérience consiste à envoyer un jet d'atome d'argent (spin 1/2) et les envoyer à travers un champ magnétique. Si l'on procède ensuite à l'analyse de la projection du spin, par exemple le long de l'axe z, on peut observer deux taches à cause du spin 1/2

$$+\frac{\hbar}{2} (50\%), \qquad -\frac{\hbar}{2} (50\%)$$
 (1.2)

Cette projection sur l'axe z dénonce la quantification, ces deux spins sont équiprobables : nous avons une chance sur deux d'avoir l'une ou l'autre. Ceci peut être décrit par le vecteur d'état

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$
 (1.3)

où l'on utilise la notation efficace  $|s, m_s\rangle$ . On retrouve bien cette équiprobabilité

$$S_{z} \begin{cases} p\left(S_{z} = \frac{\hbar}{2}\right) &= \left|\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| \psi \right\rangle\right|^{2} &= \frac{1}{2} \\ p\left(S_{z} = -\frac{\hbar}{2}\right) &= \left|\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| \psi \right\rangle\right|^{2} &= \frac{1}{2} \end{cases}$$

$$(1.4)$$

Nous avons ici travaillé avec des états purs. L'axe z étant totalement arbitraire (on doit avoir le même résultat peu importe l'axe choisi), analysons la situation selon l'axe x

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \left( \begin{array}{cc} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{array} \right) \tag{1.5}$$

Nos deux états propres sont

$$\begin{cases} |+\rangle & \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, + \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, - \frac{1}{2} \right\rangle \\ |-\rangle & \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, + \frac{1}{2} \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, - \frac{1}{2} \right\rangle \end{cases}$$

$$(1.6)$$

Calculons maintenant les probabilités

$$\begin{cases} p\left(S_x = +\frac{\hbar}{2}\right) &= |\langle +|\psi\rangle|^2 = 1\\ p\left(S_x = -\frac{\hbar}{2}\right) &= |\langle -|\psi\rangle|^2 = 0 \end{cases}$$

$$(1.7)$$

Or, ceci n'est pas ce qui est observé expérimentalement, cette modélisation de  $|\psi\rangle$  n'est pas modélisable avec des états purs, d'où une première motivation à l'utilisation des états mixtes.

#### Oscillateur harmonique (2D)

Dans ce cas, la quantification de l'énergie est donnée par

$$E_{n_x,n_y} = (1 + n_x + n_y)\hbar\omega \tag{1.8}$$

Supposons que l'on ai deux états et que l'on souhaite le décrire. Trois candidats basés sur les états purs sont possibles

$$|n_x = 1, n_y = 0\rangle, \qquad |n_x = 0, n_y = 1\rangle, \qquad \alpha |\dots\rangle + \beta |\dots\rangle$$
 (1.9)

où  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Nous ne savons pas dans lequel de ces trois états possibles nous nous trouvons, nous sommes bien dans la situation d'un manque de connaissance.

### 1.2 Opérateur densité d'un état pur

Montrons tout d'abord comment ce formalisme fonctionne lors de l'utilisation d'états purs. Ensuite, nous étendrons cette notions pour les états mixtes.

### 1.2.1 Trace, propriété de $\rho$ , Liouville quantique, mesure de l'état $\rho$

### Trace d'un opérateur

La trace d'un opérateur correspond à la trace de la matrice de cet opérateur. Soit  $\hat{A} \in \mathcal{H}$ , un opérateur hermitien et  $\{|n\rangle\}$  une base orthonormée de  $\mathcal{H}$ . On définit alors la **trace de**  $\hat{A}$ 

$$\operatorname{Tr}(\hat{A}) \equiv \sum_{n} \langle n | \hat{A} | n \rangle \tag{1.10}$$

Le choix de la base étant arbitraire, nous devrions retrouver ce résultat peu importe la base choisie. Considérons une autre base orthonormée  $\{|\overline{n}\rangle\}$  tel que nous pouvons écrire comme relation de fermeture

$$\sum_{\overline{n}} |\overline{n}\rangle \langle \overline{n}| = \hat{\mathbb{1}} \tag{1.11}$$

La définition (1.10) est équivalente à

$$\operatorname{Tr}\left(\hat{A}\right) = \sum_{n} \sum_{\overline{n}} \sum_{\overline{m}} \langle n | \overline{n} \rangle \langle \overline{n} | \hat{A} | \overline{m} \rangle \langle \overline{m} | n \rangle \tag{1.12}$$

En réorganisant les termes

$$\operatorname{Tr}(\hat{A}) = \sum_{\overline{n}} \sum_{\overline{m}} \langle \overline{n} | \hat{A} | \overline{m} \rangle \sum_{n} \underbrace{\langle \overline{m} | \overbrace{|n\rangle \langle n|} | \overline{n} \rangle}_{\delta_{\overline{m}, \overline{n}}}$$
(1.13)

Par propriété de  $\delta_{\overline{m},\overline{n}}$ , on en tire que

$$\operatorname{Tr}(\hat{A}) = \sum_{\overline{n}} = \langle \overline{n} | \hat{A} | \overline{n} \rangle \tag{1.14}$$

ce qui montre que la définition de la trace est indépendante du choix de la base. Une autre propriété intéressante est que

$$\operatorname{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \operatorname{Tr}(\hat{B}\hat{A}) \tag{1.15}$$

 $D\'{e}monstration.$ 

Insérons la relation de fermeture entre  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$ . Nous avons alors

$$\operatorname{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \sum_{n} \langle n | \hat{A}\hat{B} | n \rangle = \sum_{n} \sum_{m} \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle$$
$$= \sum_{n} \sum_{m} \langle m | \hat{B} | n \rangle \langle n | \hat{A} | m \rangle$$
$$= \sum_{m} \langle m | \hat{B}\hat{A} | m \rangle = \operatorname{Tr}(\hat{B}\hat{A})$$

$$(1.16)$$

Considérons le cas particulier ou l'on considère  $\hat{A} = |\psi\rangle\langle\varphi|$ 

$$\operatorname{Tr}(|\psi\rangle\langle\varphi|\,\hat{B}) = \sum_{n} \langle n|\psi\rangle\langle\varphi|\,\hat{B}\,|n\rangle$$

$$= \sum_{n} \langle\varphi|\,\hat{B}\,|n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

$$= \langle\varphi|\,\hat{B}\,|\psi\rangle$$
(1.17)

Ce qui revient au calcul d'un élément de matrice.

Définissions maintenant l'**opérateur densité d'état**? Soit un système dans un état  $|psi\rangle$  (normalisé). L'opérateur densité associé à cet état est

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \tag{1.18}$$

3

### Propriétés de $\hat{\rho}$

Cet opérateur a plusieurs propriétés indifférentes

i  $\hat{\rho} = \hat{\rho}^{\dagger}$  (valeur propre réelle)

ii  $\hat{\rho} \geq 0$  (valeur propre positive)

$$\begin{aligned}
\forall |\varphi\rangle : & \langle \varphi | \,\hat{\rho} \,|\varphi\rangle & \geq 0 \\
& \langle \varphi | \psi \rangle \,\langle \psi | \varphi \rangle & \geq 0 & \Leftrightarrow & |\langle \psi | \varphi \rangle|^2 \geq 0
\end{aligned} \tag{1.19}$$

Il s'agit bien d'un opérateur positif

iii  $Tr(\hat{\rho}) = 1$  (somme des valeurs propres vaut 1)

$$\operatorname{Tr}(\hat{\rho}) = Tr(|\psi\rangle\langle\psi|) = \langle\psi|\psi\rangle = 1$$
 (1.20)

Ceci est une conséquence directe de la normalisation de  $|\psi\rangle$ .

On remarque que ces trois propriétés correspondent à la définition d'une probabilité : les valeurs propres de l'opérateur  $\hat{\rho}$  vont jouer un rôle analogue aux distributions de probabilités. On peut dès lors en tirer trois autres propriétés :

1. Les éléments de matrices diagonales de l'opérateur  $\hat{\rho}$  correspondent aux probabilité de mesures du système <sup>1</sup>. La probabilité de mesurer la particule au point  $\vec{r}$  est donnée par

$$\underline{p(\vec{r})} = \langle \vec{r} | \hat{\rho} | \vec{r} \rangle \tag{1.21}$$

Démonstration.

$$p(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2 = |\langle \vec{r} | \psi \rangle|^2 = \langle \vec{r} | \psi \rangle^* \langle \vec{r} | \psi \rangle$$
  
=  $\langle \vec{r} | \psi \rangle \langle \psi | \vec{r} \rangle$   
=  $\langle \vec{r} | \hat{\rho} | \vec{r} \rangle$  (1.22)

Vérifions que ceci est consistant

$$\int p(\vec{r}) \ d\vec{r} = \int \langle \vec{r} | \hat{\rho} | \vec{r} \rangle \ d\vec{r} = \text{Tr} \, \hat{\rho} = 1$$
 (1.23)

Ceci étant connecté à la notion de probabilité, la normalisation prend tout son sens. Ceci était pour l'observable position, voyons pour un autre observable.

2. Soit  $\hat{A}$ , de valeurs propres  $a_i$  et  $\hat{P}_i = \sum_{j=1}^{d_i} |\varphi_{ij}\rangle \langle \varphi_{ij}|$  (le projecteur associé à la valeur propre  $a_i$ ). La probabilité de mesurer  $a_i$  peut s'écrire

$$\underline{p(a_i) = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{P}_i)}$$
 (1.24)

 $D\'{e}monstration.$ 

$$p(a_{i}) = \|\hat{P}_{i} |\psi\rangle\|^{2} = \langle \psi | \hat{P}_{i} |\psi\rangle$$

$$= \sum_{k} \langle \psi | \hat{P}_{i} |u_{k}\rangle \langle u_{k} |\psi\rangle$$

$$= \sum_{k} \langle u_{k} | \underbrace{|\psi\rangle \langle \psi|}_{\hat{\rho}} \hat{P}_{i} |u_{k}\rangle = \operatorname{Tr}(\hat{\rho}\hat{P}_{i})$$
(1.25)

1. La matrice de l'opérateur densité  $\hat{\rho}$  est la matrice densité.

Ceci est cohérent avec ce que nous avions obtenu avec l'observable  $\vec{r}$ 

$$\hat{Pr} = |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}| \rightarrow p(\vec{r}) = \text{Tr}(\hat{\rho}|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|) = \langle\vec{r}|\hat{\rho}|\vec{r}\rangle$$
(1.26)

3. Montrons que ceci est consistant avec la notion de valeur moyenne de l'opérateur  $\hat{A}$ . Cette dernière s'exprime

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A})$$
 (1.27)

Démonstration.

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{i} a_{i} p(a_{i}) = \sum_{i} a_{i} \operatorname{Tr} \left( \hat{\rho} \hat{P}_{i} \right)$$

$$= \operatorname{Tr} \left( \hat{\rho} \underbrace{\left( \sum_{i} a_{i} \hat{P}_{i} \right)}_{\hat{A}} \right)$$
(1.28)

où nous avons utiliser la décomposition spectrale de l'opérateur  $\hat{A}$ .

Ceci est un formalisme différent, mais équivalent à celui vu précédemment.

### Équation de Liouville quantique

Reprenons l'équation de Schrödinger temporelle

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle$$
 (1.29)

Intéressons nous à la dérivée temporelle de  $\hat{\rho}$ , multipliée par  $i\hbar$ 

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = i\hbar \left(\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle\right) \langle \psi(t)| + i\hbar |\psi(t)\rangle \left(\frac{d}{dt} \langle \psi(t)|\right)$$

$$= \hat{H} \underbrace{|\psi\rangle \langle \psi|}_{\hat{\rho}} - \underbrace{|\psi\rangle \langle \psi|}_{\hat{\rho}} \hat{A}$$

$$= [\hat{H}, \hat{\rho}]$$
(1.30)

où nous avons utilisé l'équation de Schrodinger dépendante du temps ainsi que son équation conjuguée pour exprimer les dérivées des vecteurs d'états. Il s'agit de l'**équation de Liouville quantique**. Ce formalisme est identique à celui de la mécanique quantique; nous avons ici vu un "autre langage" d'écrire les états purs, que nous allons étendre aux états mixtes.

Notons qu'il est possible d'obtenir le théorème d'Ehrenfest à partir de la relation suivante (vu en séance d'exercices)

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) \qquad \Leftrightarrow \qquad i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A})$$
 (1.31)

### 1.3 Opérateur densité d'un mélange statistique

Un état pure d'un système, par exemple  $|\psi_i\rangle \langle \psi_i|$  est caractérisé par le déterminisme de la mécanique classique dans l'évolution de l'état quantique<sup>2</sup>. Par contre, un état mixte est un mélange statistique d'états purs. On verra que l'on peut toujours écrire un état mixte

$$\sum_{i} p_{i} |\psi_{i}\rangle \langle \psi_{i}| \tag{1.32}$$

où les  $p_i$  sont les probabilités du mélange statistique, et les  $|\psi_i\rangle \langle \psi_i|$  les différents états purs du système <sup>3</sup>.

### 1.3.1 Définition, propriétés de $\hat{\rho}$ , interprétation (diagonalisation)

#### **Définition**

Soit  $\{|\psi_k\rangle, p_k\}$  un **ensemble statistique** où les  $p_k$  représentent les probabilités  $(p_k \ge 0, \sum_k p_k = 1)$  et où les  $|\psi_k\rangle$  ne sont pas forcément orthogonal (mais normalisés). On va définir, comme annoncé dans l'introduction, les **états mixtes**:

$$\hat{\rho} = \sum_{k} p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \tag{1.33}$$

où  $|\psi_k\rangle\langle\psi_k|=\hat{\rho_k}$  est un projecteur. Cette définition nous dit que l'opérateur densité est une combinaison complexe d'opérateur densité purs  $\hat{\rho_k}$ , pondérée par une probabilité.

### Propriétés de $\hat{\rho}$

• Mesure de  $\hat{A}$ . Rappelons-nous que

$$p(a_i|k) = \langle \psi_k | \hat{P}_i | \psi_k \rangle = \text{Tr}(|\psi_k\rangle \langle \psi_k | \hat{P}_i) = \text{Tr}(\hat{\rho}_k \hat{P}_i)$$
(1.34)

où  $\hat{\rho_k}$  est l'opérateur densité correspondant à l'état pur  $|\psi_k\rangle$ . Nous voulons maintenant <sup>4</sup>

$$p(a_i) = \sum_{k} p_k \ p(a_i|k) = \sum_{k} p_k \operatorname{Tr}\left(\hat{\rho_k}\hat{P}_i\right) = \operatorname{Tr}\left(\left(\sum_{k} p_k \hat{\rho_k}\right)\hat{P}_i\right) = \operatorname{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{P}_i\right)$$
(1.35)

où nous avons utilisé (1.33). Ceci nous montre que le formalisme introduit ici est général, la forme obtenue étant la même que pour les états purs.

• La valeur moyenne de l'opérateur  $\hat{A}$  s'obtient

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} \Big( \hat{\rho} \hat{A} \Big) \tag{1.36}$$

Démonstration.

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{k} p_{k} \langle \psi_{k} | \hat{A} | \psi_{k} \rangle = \sum_{k} p_{k} \operatorname{Tr} \left( \underbrace{|\psi_{k}\rangle \langle \psi_{k}|}_{\hat{\rho_{k}}} \hat{A} \right) = \operatorname{Tr} \left( \left( \sum_{k} p_{k} \hat{\rho_{k}} \right) \hat{A} \right)$$
(1.37)

2. Sauf lorsqu'il y a une mesure

3. Source : Wikipedia

4. Multiplication de deux probas? Pas clair.

• L'équation de Liouville quantique a elle aussi une forme similaire à celle obtenue pour les états purs

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = i\hbar \frac{d}{dt} \left( \sum_{k} p_{k} \hat{\rho}_{k} \right)$$

$$= \sum_{k} p_{k} \underbrace{i\hbar \frac{d\hat{\rho}_{k}}{dt}}_{[\hat{A},\hat{\rho}_{k}]}$$

$$= \left[ \hat{H}, \sum_{k} p_{k} \hat{\rho}_{k} \right] = [\hat{H}, \hat{\rho}]$$
(1.38)

Si nous calculons la trace de  $\hat{\rho}_k^2$ , nous obtenons

$$\operatorname{Tr}\left(\hat{\rho}_{k}^{2}\right) = \hat{\rho}_{k} = 1\tag{1.39}$$

car  $\hat{\rho_k}$  est idempotent. Ceci est vrai **pour un état pur** mais en général

$$Tr(\hat{\rho}^2) \le 1 \tag{1.40}$$

Il s'agit de la seule différence entre un état pur et un état mixte. Pour un état mixtes, nous avons donc  $\hat{\rho} = \hat{\rho}^{\dagger}, \hat{\rho} \ge 0, Tr(\hat{\rho}) = 1$  mais  $Tr(\hat{\rho}^2) \le 1$ .

### Diagonalisation de $\hat{\rho}$ (interprétation)

A l'aide du théorème de décomposition spectrale, nous pouvons écrire  $\hat{\rho}$  à l'aide de ses valeurs et vecteurs propres

$$\hat{\rho} = \sum_{i} \Pi_{i} |\chi_{i}\rangle \langle \chi_{i}| \tag{1.41}$$

où les  $\Pi_i \geq 0$  sont les valeurs propres de l'opérateur densité et les  $|\chi_i\rangle$  sont les vecteurs propres (orthogonaux) de ce même opérateur.

Ceci peut s'interpréter comme un mélange des  $|\chi_i\rangle$ . Nous pouvons remarquer que toutes les expressions précédemment obtenues ne dépendaient toujours que de  $\hat{\rho}$  et jamais des  $|\psi_k\rangle$ : tout est caractérisé par  $\hat{\rho}$ . Ceci montre qu'il peut y avoir des cas où il n'est pas possible d'extraire l'état dans laquel le système a été préparé : on peut comprendre que l'expérience de S&G est une combinaison de spin up et down mais l'axe sur lequel on prend la mesure n'a pas d'importance car, peu importe celui-ci, la matrice densité contient toute l'information, les propriétés physiques ne dépendent de rien d'autre que de  $\hat{\rho}$ .

Un autre point à soulevé est que la notion de phase globale disparaît totalement lors du traitement des états mixtes. Soit  $|\psi'\rangle=e^{i\alpha}|\psi\rangle$ 

$$\hat{\rho}' = |\psi'\rangle\langle\psi'| = e^{i\alpha}|\psi\rangle\langle\psi|e^{-i\alpha} = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{\rho}$$
(1.42)

Il n'y a donc plus de notion de phase globale : ceci montre que  $\hat{\rho}$  est l'unique représentation du système. L'opérateur densité  $\hat{\rho}$  est **complet** et l'**unique** représentation d'un état du système <sup>5</sup>.

<sup>5.</sup> Unique car il n'y a pas de phase globale irrelevante.

Interprétons maintenant l'experience de Stern et Gerlach pour des atomes non polarisés. Empiriquement, la probabilité de mesurer un spin up ou down est identique et vaut 1/2. Soit la projection du spin selon l'axe  $\vec{u}$ 

$$\hat{S}u = \hat{\vec{S}}.\vec{u} \tag{1.43}$$

La matrice densité décrivant l'état de notre système s'écrit

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0\\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hat{\mathbb{1}}$$

$$\tag{1.44}$$

Une rotation de la matrice identité reste une matrice identité : peu importe l'axe de mesure, les probabilités de mesures seront les mêmes, nous avons correctement décrit notre système.

Si l'on s'intéresse à la valeur moyenne

$$\langle \hat{S}u \rangle = \langle \hat{\vec{S}}.\vec{u} \rangle = \langle S_x \rangle u_x + \langle S_y \rangle u_y + \langle S_z \rangle u_z$$

$$= \operatorname{Tr}(\hat{\rho}.S_x)u_x + \operatorname{Tr}(\hat{\rho}.S_y)u_y + \operatorname{Tr}(\hat{\rho}.S_z)u_z$$

$$= \frac{u_x}{2}\operatorname{Tr}(S_x) + \frac{u_y}{2}\operatorname{Tr}(S_y) + \frac{u_z}{2}\operatorname{Tr}(S_z)$$

$$= 0$$

$$(1.45)$$

car les traces des matrices de Pauli sont nulles. On voit donc que peu importe la direction, on observe le même caractère équiprobable.

Nous savons maintenant que la représentation suivante est fausse

$$|\psi\rangle \neq \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \tag{1.46}$$

Pour le montrer, considérons la matrice densité associé à ce  $|\psi\rangle$ 

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{1.47}$$

La diagonalisation de la matrice dans la base des états propres donne alors

$$1 \mid + \rangle \langle + \mid + 0 \mid - \rangle \langle - \mid \qquad \rightarrow \qquad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.48}$$

ce qui ne correspond clairement pas à la réalité physique observée : on se retrouve dans un autre état en diagonalisant dans la base des états propres.

On ne connaît pas la direction de polarisation. Concluons pen montrant quel est le candidate stae

$$24$$
 (1.49)

### 1.4 Distribution de Wigner

### 1.4.1 Définition, propriétés de W(x,p), négativité de W(x,p)