Systèmes quantiques et espace de Hilbert

N. Fabre*

February 10, 2024

1 Systèmes quantiques

Zoologie des systèmes quantiques

Qu'est ce qu'un système quantique?

• L'échelle est un critère important pour déterminer si un système est quantique. En effet, les effets quantiques sont généralement plus importants à l'échelle microscopique, où les objets sont beaucoup plus petits que la **longueur de De Broglie**, $\lambda = \hbar/p$ (voir la définition du cours précédent) de l'assemblée de particules (ou d'une seule) qui les composent. Cette longueur de De Broglie caractérise la **cohérence** du paquet d'onde, la longueur pour laquelle les particules dans ce périmètre vont pouvoir se "parler" entre elles et exhiber des effets collectifs. Refroidir un gaz est parfois l'ingrédient pour diminuer sa vitesse, afin d'augmenter la longueur de De Broglie, et pouvoir observer des manifestations d'effets quantiques de plus grande longueur. Réussir à maintenir la cohérence sur des systèmes de grande taille est difficile. Actuellement, les effets quantiques pour des particules massives à température ambiante parviennent à résister sur des tailles maximales de l'ordre du micromètre. Pour des gaz refroidis, comme les condensats de Bose-Einstein, la taille de ces systèmes quantiques peut atteindre jusqu'au millimètre. On peut produire des paires de photons intriquées (masse nulle, et rayon nul, de telle sorte que la cohérence de ce type de système n'est pas décrite par la longueur de De Broglie) à température ambiante.

• Parfois, le critère de l'action, qui est la norme du moment cinétique, est utilisé. Si cette action est très largement supérieure à la constante de Planck, on dira que le système est classique. Si cette action est environ égale à la constante de Planck, on dira que le système exhibe des effets quantiques. Ce critère est assez qualitatif et n'est pas utilisé sous cette forme en pratique.

En pratique, ce qui est quantique et ce qui ne l'est pas est encore très largement débattu et plus subtil que les arguments précédents. On utilise d'autres expériences plus quantitatives pour comparer les effets de systèmes décrits par la physique classique et quantique, telles que l'expérience d'Hanbury-Brown et Twiss, la violation des inégalités de Bell (voir cours 6), l'obtention de résultats de mesure qui prendraient un temps plus conséquent avec des machines classiques (n'utilisant pas des ressources quantiques)...

Il existe un grand nombre de systèmes pouvant être décrits par la mécanique quantique. Ce n'est pas le but d'être exhaustif ici, mais l'objectif est de dévoiler une partie des systèmes quantiques que l'on va décrire mathématiquement.

Les photons sont les particules de lumière et constituent les quanta du champ électromagnétique. Ils sont dépourvus de masse, c'est un boson de spin 1, avec seulement deux états de polarisation (au lieu de 3) du fait de sa masse nulle. Le photon possède toute une gamme de degrés de libertés, fréquence, spatial pouvant servir à encoder de l'information quantique. Ce sont des candidats naturels pour des applications en communication quantique, car les photons voyagent à la vitesse de la lumière et sont peu sensible à la décohérence (cf cours plus tard). Des ordinateurs quantiques à base de photons commencent à voir le jour (voir la start-up française Quandela).

Les électrons sont des composants fondamentaux des atomes et des matériaux. Ils présentent des propriétés de spin et de charge qui influencent leur comportement au niveau quantique. Les électrons dans un matériau peuvent former des bandes d'énergie, ce qui est crucial pour comprendre les propriétés des semi-conducteurs et

*nicolas.fabre@telecom-paris.fr

des conducteurs (voir à partir du cours 9).

Les ions piégés sont des atomes qui ont perdu ou gagné un ou plusieurs électrons, les rendant chargés électriquement. Ils peuvent être manipulés et piégés dans des champs électromagnétiques, et leur état quantique peut être contrôlé avec une grande précision, ce qui en fait des candidats prometteurs pour les calculs quantiques (voir la compagnie américaine IonQ).

Les niveaux d'énergie interne d'un atome se réfèrent aux différents états quantiques dans lesquels un électron peut se trouver autour du noyau d'un atome. Ces niveaux d'énergie donnent lieu à des spectres de raies caractéristiques, qui sont utilisés pour identifier les éléments et étudier les interactions lumière-matière.

Les résonateurs nanomécaniques (aka un oscillateur harmonique quantique) sont des systèmes physiques qui oscillent à des fréquences très élevées à l'échelle nanométrique. Ils peuvent être utilisés pour explorer les limites de la mécanique quantique à des échelles macroscopiques, ainsi que pour des applications en capteurs ultra-sensibles.

Jonction de Josephson L'effet Josephson est l'apparition d'un courant (supracourant) entre deux matériaux supraconducteurs séparés par un matériau isolant ou métallique. Cette effet est utilisé pour créer des qubits supraconducteurs (voir Google et IBM), ou détecteurs de haute précision pour mesurer des champs magnétiques.

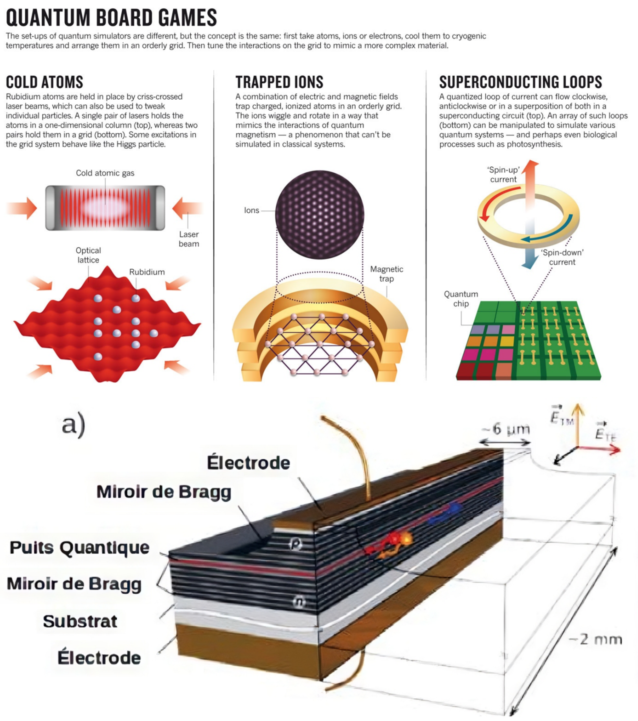

Figure 1: (Gauche) Différents systèmes quantiques utilisés dans des technologies quantiques (provient de `https://www.nature.com/articles/491322a`). (Droite) Diode laser émettant des paires de photons : la structure, contenant un puits quantique, est optimisée pour générer l'émission laser et la convertir directement en paires de photons à l'intérieur du même dispositif fonctionnant à température ambiante. De `https://www.photoniques.com/articles/photon/pdf/2018/03/photon201891p25.pdf` (Crédits images : Laboratoire MPQ Université Paris Diderot/CNRS).

2 Fonction d'onde et espace de Hilbert

2.1 Pourquoi une fonction d'onde?

Un système physique parfaitement préparé est d'écrit par un vecteur $|\psi\rangle$ appartenant à un espace de Hilbert. Cet espace de Hilbert dans lequel vit la fonction d'onde répond à toutes les contraintes expérimentales jusque là observé. $\mathcal{H}$ espace vectoriel de dimension n sur $\mathbb{C}$ muni d'un produit scalaire défini positif: espace de Hilbert.

Le fait que $\mathcal{H}$ soit un espace vectoriel permet de construire la superposition cohérente des états $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$, $\lambda_{1,2} \in \mathbb{C}$ tel que $\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 \in \mathcal{H}$.

Le mot superposition n'est pas choisi au hasard : c'est celui qu'on utilise dans divers domaines de la physique pour exprimer des solutions d'équations linéaires, dont les combinaisons linéaires de solutions sont elle-mêmes des solutions. Le cas le plus connu est celui de l'électromagnétisme, où le champ est généralement exprimé comme une combinaison linéaire de solutions simples des équations de Maxwell, souvent des ondes planes ou sphériques monochromatiques. Ce formalisme permet en particulier de prédire tous les phénomènes d'interférences et de diffraction que l'on retrouve naturellement en physique quantique.

Nota bene

Attention, $\mathcal{H}$ n'est en aucun cas $\mathbb{R}^3$ (l'espace des positions possibles pour un point matériel), ni même $\mathbb{R}^6$ (l'espace des phases des positions et des vitesses): la physique quantique n'est pas la physique classique! Mais c'est le même concept: là où la mécanique classique représente l'état d'un point matériel par un vecteur $\mathbb{R}^6$ qui varie dans le temps, la mécanique quantique représentera l'état d'un système par un vecteur de $\mathcal{H}$ qui variera dans le temps. $\mathcal{H}$ sera a priori plus complexe, mais nous verrons que ce n'est pas un problème.

2.2 Espace de Hilbert

Décrivons quelques propriétés fondamentales des espaces de Hilbert. Une fonction d'onde est un vecteur complexe appartenant à un espace de Hilbert muni d'un produit scalaire. Nous utilisons la notation de Dirac. Cette notation rend les calculs plus commodes et évite la confusion avec les vecteurs de l'espace $\mathbb{R}^3$ des positions que nous serons amenés à manipuler simultanément. De plus, cette notation permet plus aisément de manipuler des espaces de dimensions finies de grande dimension, voir infinie.

Mentionnons trois propriétés sur les vecteurs d'un espace Hilbertien:

• Linéarité: $\langle\chi|\psi_1 + \lambda\psi_2\rangle = \langle\chi|\psi_1\rangle + \lambda\,\langle\chi|\psi_2\rangle$.
• Propriété complexe conjugué: $\langle\chi|\psi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle^*$.
• Produit scalaire positif: $\langle\psi|\psi\rangle = 0 \rightarrow |\psi\rangle = 0$.

Decomposition dans base orthonormée de $\mathcal{H}$:
• La relation d'orthogonalité: $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ (ce n'est pas une nécessité pour décomposer un vecteur dans une base)
• La relation de fermeture dans un espace de Hilbert de dimension d: $\sum_{n=1}^{d} |n\rangle\langle n| = \mathbb{I}_d$. $\mathbb{I}_d$ est la matrice identité, la matrice contenant que des 1 sur la diagonale et des 0 sinon. Attention, on peut avoir une relation de fermeture impliquant une base pas nécessairement orthogonale.

De la relation de fermeture, en appliquant un $|\psi\rangle$ par la droite, on obtient:

$$\mathbb{I}_d\,|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{d} |n\rangle\langle n|\psi\rangle\,. \tag{1}$$

On obtient alors le développement de la fonction d'onde dans la base $|n\rangle$, qui s'écrit soit avec la notation ket ou avec une notation matricielle:

$$\boxed{|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{d} \psi_n\,|n\rangle = \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ .\\ .\\ .\\ \psi_d\end{pmatrix}} \tag{2}$$

où $\psi_n = \langle n|\psi\rangle \in \mathbb{C}$ est une amplitude de probabilité associée à l'état n. L'Eq. (2) décrit un état quantique dans une superposition d'états labelisé par n. La probabilité associée à l'état n est le module au carré de l'amplitude de probabilité soit $|\langle n|\psi\rangle|^2 \in \mathbb{R}$, et dont une stratégie peut être dérivée pour la mesurer. Le bra est définie un vecteur appartenant à l'espace dual de l'espace de Hilbert comme:

$$\langle\psi| = (\psi_1^*\ \psi_2^*\ .\ .\ .\ \psi_d^*) \tag{3}$$

Prenons maintenant un autre vecteur: $|\chi\rangle = \sum_{n=1}^{d} \chi_n |n\rangle$. Le produit scalaire permet de mesurer la distance entre deux états. Il est défini par la formule suivante:

$$\langle\chi|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{d}\sum_{m=1}^{d} \chi_m^* \psi_n \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{nm}} = \sum_{n=1}^{d} \chi_n^* \psi_n \tag{4}$$

qui peut également s'écrire de manière matricielle:

$$\langle\chi|\psi\rangle = (\chi_1^* \ \chi_2^* \ . \ . \ . \ \chi_d^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ . \\ . \\ . \\ \psi_d \end{pmatrix} = \sum_{n=1}^{d} \chi_n^* \psi_n \in \mathbb{C}. \tag{5}$$

En particulier, si on a $\langle\chi|\psi\rangle = 0$, alors les deux états sont dit orthogonaux. L'orthogonalité permet de décrire la relation entre deux états qui ne peuvent pas se superposer. La propriété de complétude permet de garantir que toute suite de vecteurs convergents converge vers un vecteur de l'espace de Hilbert. La norme d'un vecteur est définie également à partir du produit scalaire:

$$||\psi||^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{d} |\psi_n|^2 = 1 \geq 0. \tag{6}$$

Comme $|\psi_n|^2$ s'interprète comme une probabilité de trouver le système quantique dans l'état n, alors cette somme est nécessairement égal à 1 (comme toute probabilité qui se respecte).

La notation matricielle est notamment très utile pour des espaces de faibles dimension, 2 ou 3. Pour des espaces de dimension infinie (lorsque $d \to \infty$), la notation de Dirac sera indispensable. Le cas des espaces de Hilbert de dimension infinie sera vu au cours de la 7ème séance, et permettra entre autre de décrire la position-impulsion d'un électron non-relativiste, la position d'un nanorésonateur mécanique, un oscillateur harmonique quantique, etc.

[**Example en dimension 2; le qubit**] Prenons un cas plus simple, une fonction d'onde appartenant à un espace de Hilbert de dimension 2:

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \tag{7}$$

α et β sont les coefficients de la décomposition, it les amplitudes de probabilité de l'état 0 et 1, et $|0\rangle, |1\rangle$ sont les vecteurs de la base. Le bra représente un vecteur ligne, et chaque coefficient passe sous son complexe conjuguée:

$$\langle\psi| = \alpha^* \langle 0| + \beta^* \langle 1| = (\alpha^* \ \beta^*) \tag{8}$$

On a les relations $\langle 0|1\rangle = 0$ (orthogonalité) et $\langle 0|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1$. C'est le fameux qubit, dont la séance 4 sera consacrée dessus. La normalisation de la fonction d'onde impose que $\langle\psi|\psi\rangle = 1 = |\alpha|^2 + |\beta|^2$.

Recap: Représentation des états quantiques

L'état d'un système quantique est représenté par un vecteur (a priori normé) d'un espace de Hilbert (espace vectoriel Hilbertien sur C).
On postule que toute l'information du système quantique est comprise dans ce vecteur, qui nous permettra d'en déduire les probabilités des résultats de mesure des grandeurs physiques.

Exemple d'espace de Hilbert et de système physiques associées.
On représente certains exemples de systèmes quantiques sur la Fig. 2.

Dimension 2:

• Spin 1/2, polarisation de photon unique, états fondamental-excité d'un atome, systèmes atomiques artificiels, transition électronique dans certaines molécules. En effet, dans certaines molécules, les électrons peuvent se trouver dans deux états d'énergie différents. La transition entre ces deux états est appelée transition électronique. L'espace de Hilbert associé à la transition électronique dans certaines molécules est donc de dimension 2. En revanche, si le laser d'excitation est proche de la résonance d'une seule transition, les autres niveaux ne seront pas peuplés.

Dimension d:

• Les systèmes quantique spouvant se décrire comme vecteur dans un espace de Hilbert de dimension d sont le moment orbital angulaire de photons uniques, temps d'arrivée et fréquence de photons uniques et niveaux d'energies d'un atome ou d'un ion.

Dimension infinie:

Dans ce cas, il faut faire attention à la convergence des séquences dans le cas des dimensions infinies.
• Espace des séquences de carré sommable $l^2 = \{\psi_n : \mathbb{Z} \to \mathbb{C} : \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n|^2 < \infty\}$. C'est le cas où $d \to \infty$. Example: états de Fock (voir cours 2A "technologies quantiques").

Il n'existe pas que des espaces de séquences de dimension infinie qui sont utiles pour décrire des systèmes quantiques mais également des espaces de fonction.

• Espace de fonctions dont le carré est intégrable: $L^2(\mathbb{R}) = \{\psi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{C} \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx < \infty\}$ Quadrature du champ électromagnétique dans un mode donné, position-impulsion d'un électron non relativiste (ou de toute autre particule massive exhibant des phénomènes d'interférence dans l'expérience de Young), position-impulsion d'un nanorésonateur mécanique. Le fameux chat de Schroedinger est aussi un état à variable continue (superposition de deux états macroscopiques avec deux phases différentes).

• Espace de fonction de carré sommable sur un intervalle $[a, b]$: $L^2([a, b]) = \{\psi(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{C} \int_a^b |\psi(x)|^2 dx < \infty\}$. Exemple: puit quantique, barrière de potentiel (voir séance 8).

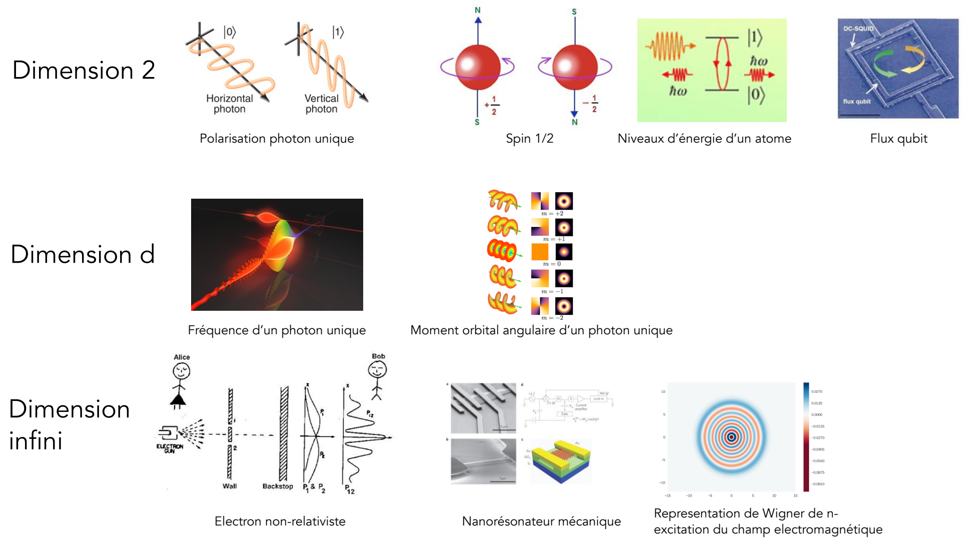

Figure 2: Système quantiques et la dimension associée à leur espace de Hilbert descriptif. Images issues d'Internet.

2.3 Opérateurs

En mécanique quantique, les opérateurs occupent une place centrale en décrivant l'évolution et les opérations logiques de systèmes quantiques. Ces opérateurs, représentés mathématiquement par des matrices linéaires, agissent sur les fonctions d'onde, qui décrivent l'état quantique d'une particule. Les opérateurs agissent comme des "instructions" sur les fonctions d'onde, permettant de calculer diverses grandeurs physiques associées à la particule, telles que la position, la quantité de mouvement, l'énergie, etc. Par exemple, l'opérateur position agit sur une fonction d'onde pour extraire la position probable de la particule. Ces opérateurs agissent sur des fonctions d'onde appartenant à des espaces de Hilbert de dimensions finies ou infinies. Des représentations sont privilégiés selon l'espace considéré. Un opérateur **linéaire** $\hat{A}$ fait correspondre au vecteur $|\phi\rangle$ un vecteur $\left|\hat{A}\phi\right\rangle$

vérifiant la propriété de linéarité:

$$\left|\hat{A}(\psi + \lambda\chi)\right\rangle = \left|\hat{A}\psi\right\rangle + \lambda\left|\hat{A}\chi\right\rangle \tag{9}$$

Le chapeau est une notation habituelle en mécanique quantique pour désigner les opérateurs (qui est parfois omis, au même titre que la flèche des vecteurs en algèbre linéaire). Dans une base déterminée, cet opérateur est représenté par une matrice d'éléments $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle = \left\langle m\middle|\hat{A}n\right\rangle$. L'opérateur conjugué hermitien (ou adjoint) $\hat{A}^\dagger$ de $\hat{A}$ est défini par:

$$\langle\chi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle = \left\langle\chi\middle|\hat{A}^\dagger\psi\right\rangle = \langle A\chi|\psi\rangle = \left\langle\psi\middle|\hat{A}\chi\right\rangle^* \tag{10}$$

C'est également un opérateur linéaire, dont les éléments de matrice sont: $A^\dagger_{mn} = A^*_{nm}$ (transposée et complexe conjuguée).

Vecteur propre - valeur propre (formel) Soit $\hat{A}$ un opérateur linéaire: s'il existe un vecteur $|\psi\rangle$ et un nombre complexe a tels que:

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle \tag{11}$$

alors $|\psi\rangle$ est appelé vecteur propre et a est sa valeur propre associée. Les valeurs propres sont obtenues en résolvant l'equation $\det(A - aI) = 0$, soit les racines du polynôme caractéristique. Les vecteurs propres sont ensuite trouvés grâce à $|\psi\rangle \in \mathrm{Ker}(A - aI)$, ce qui revient à trouver le vecteur qui dont toutes les sommes sur les lignes sont nulles. Un cas pratique de diagonalisation d'opérateur sera donné au cours du TD sur la molécule d'ammoniac.

De manière remarquable, les opérateurs **hermitiens** sont d'une importance particulière en mécanique quantique définit comme $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, où $\hat{A}^\dagger = \overline{\hat{A}^T}$. A noter la propriété pour les opérateurs hermitiens:

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A} \neq \hat{A}\hat{B} \tag{12}$$

ainsi que

$$\left\langle\psi\middle|\hat{A}\phi\right\rangle = \left\langle\psi\hat{A}^\dagger\middle|\phi\right\rangle \tag{13}$$

A noter que les valeurs propres d'un opérateur hermitien sont réelles et les vecteurs propres correspondant à deux valeurs propres sont orthogonaux. Nous verrons dans le cours prochain le lien entre la mesure expérimentale, la notion d'observable et les opérateurs hermitiens.

Opérations unitaires Une opération unitaire est une transformation linéaire (et donc différent des matrices stochastiques dans le cas classique) qui conserve la norme des vecteurs d'état quantique $||\hat{U}|\psi\rangle|| = ||\,|\psi\rangle\,||$, préservant ainsi les probabilités associées aux différentes configurations quantiques. Les opérations unitaires peuvent modéliser divers processus quantiques, tels que l'évolution temporelle d'un système isolé ou les transformations subies par une particule lors de l'interaction avec un champ extérieur.

Une matrice carré est dit **unitaire** si elle satisfait les équations:

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \mathbb{I}\ ,\ \hat{U}^\dagger\hat{U} = \mathbb{I} \tag{14}$$

$\mathbb{I}$ est l'opérateur identité dans l'espace de Hilbert considéré. On peut en déduire que $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$. En outre, les opérations unitaires sont réversibles soulignant l'idée que l'évolution des systèmes quantiques peut être inversée sans perte d'information. Une représentation explicite de $\hat{U}$ en dimension finie est $\hat{U} = \sum_{n,m} f_{n,m}|n\rangle\langle m|$, où pour que la matrice soit unitaire, on a: $\sum_m f_{nm}f^*_{nm} = \delta_{nn'}$ (à vous de vérifier cette propriété).

La **trace** d'un opérateur est la somme de ses éléments diagonaux:

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}) = \sum_{i=1}^{N} A_{ii} \tag{15}$$

Nous aurons pas besoin d'un usage extensif de la trace d'un opérateur dans ce cours. C'est une opération très utilisée en mécanique quantique, permettant par exemple de décrire de manière plus générale une mesure, l'ignorance sur certains sous-parties d'un système. Nous laissons cela de côté, cela sera vu dans le cours de 2A intitulé "Technologies Quantiques".

Commutateur: Le commutateur de deux opérateurs est défini par:

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{16}$$

• ♣ La non-commutation d'opérateurs hermitiens correspond à l'impossibilité de les mesurer simultanément (voir cours suivant).
• Si ces opérateurs sont des matrices unitaires, le fait d'appliquer d'abord une opération décrite par l'opérateur $\hat{A}$, puis par l'opérateur $\hat{B}$ donne des résultats différents que si on applique $\hat{B}$ puis $\hat{A}$.
• ♣ Deux opérateurs qui commutent signifient que l'on peut trouver une base commune de vecteurs propres diagonalisant simultanément ces deux opérateurs. On explicite plus ce résultat dans l'appendice.

Aide

Passage au dual

$$|\psi\rangle \to \langle\psi| \tag{17}$$

$$\lambda\,|\psi\rangle \to \lambda^*\,\langle\psi| \tag{18}$$

$$\hat{A}\,|\psi\rangle \to \langle\psi|\,\hat{A}^\dagger \tag{19}$$

$$\lambda\hat{A}\hat{B}\,|\psi\rangle \to \lambda^*\,\langle\psi|\,\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \tag{20}$$

Attention à l'ordre des opérateurs!

Exemple: Donnons un premier exemple d'opérateurs. Les opérations de Pauli sont:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{21}$$

On observe que:

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z \quad \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_y \quad \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_x. \tag{22}$$

Et également,

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \mathbb{I}_2. \tag{23}$$

Ce sont des opérations de base dans la manipulations de qubits, et une representation en terme de circuits quantiques va être donnée dans la section suivante.

3 Représentation de la manipulation de qubits avec des circuits quantiques

Pour pouvoir représenter la manipulation de qubits, une représentation est en terme de circuits quantiques, notation utile dans tous les domaines d'applications des technologies quantiques pour représenter la génération, la manipulation-propagation, puis la mesure des systèmes quantiques.

Le modèle de circuit quantique est un formalisme de base pour représenter et exécuter des calculs quantiques. Il décrit le calcul quantique comme une séquence ordonnée de portes quantiques et de mesures qui peuvent fournir des informations pour contrôler d'autres opérations. Les opérations quantiques sont représentées par des boîtes noires dans un circuit quantique. Ces boîtes noires symbolisent les transformations unitaires qui sont appliquées aux qubits, les bits quantiques. Les qubits peuvent exister dans un état superposé, ce qui signifie qu'ils peuvent représenter simultanément plusieurs valeurs classiques. Les opérations quantiques permettent de manipuler ces états superposés et d'exploiter les propriétés uniques de la mécanique quantique pour effectuer des calculs complexes. Dans la Fig. 3, on montre la représentation des opérations dans un circuit quantique. Les opérations successives sont effectuées de gauche à droite, guidées par un fil quantique représenté par une ligne noire. Le fil quantique connecte les qubits et permet aux opérations de se propager entre eux.

Exemple: L'opération Hadamard est une opération quantique fondamentale qui est souvent utilisée dans les circuits quantiques. Elle transforme les qubits logiques comme:

$$\hat{H}\,|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \tag{24}$$

$$\hat{H}\,|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \tag{25}$$

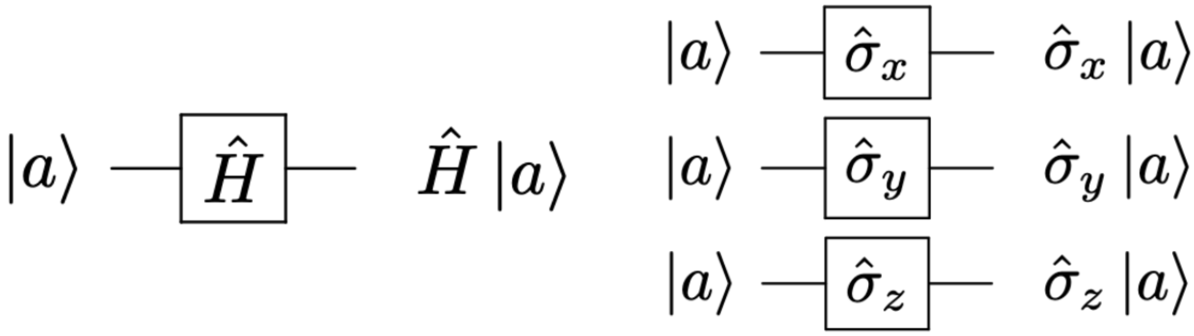

Figure 3: Circuit quantique à 1 qubit, où $a = 0, 1$. Une barre horizontale représente la direction de propagation de l'information quantique. Durant ce trajet, des opérations peuvent être effectuées, comme ici la porte de Hadamard et les matrices de Pauli.

Sous forme matricielle, la porte d'Hadamard s'écrit: $\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$

Calcul élémentaire

A quoi correspondent les opérations, matrices de Pauli, sur un qubit?
(1) $\hat{\sigma}_x$ permet d'effectuer une inversion de bit (bit flip). Pourquoi?
(2) $\hat{\sigma}_z$ permet d'effectuer une inversion de signe (phase flip). Pourquoi?
(3) $\hat{\sigma}_y$ permet d'implémenter à une phase globale près une inversion de signe suivie d'une inversion de bit. Pourquoi?
(4) Une porte intervenant fréquemment en information quantique est la porte $\pi/4$, qui se met sous la forme :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i\pi/4}\,|1\rangle) \tag{26}$$

Quelle est la matrice unitaire associée ?

Maintenant observons l'impact de la non-commutation d'opérateurs unitaires sur un exemple simple. Appliquons d'abord la porte de Hadamard sur le qubit $|0\rangle$, puis la porte $\hat{\sigma}_x$:

$$|0\rangle \xrightarrow{\hat{H}} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \xrightarrow{\hat{\sigma}_x} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle). \tag{27}$$

Maintenant, appliquons la porte $\hat{\sigma}_x$ et la porte d'Hadamard, on obtient:

$$|0\rangle \xrightarrow{\hat{\sigma}_x} |1\rangle \xrightarrow{\hat{H}} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \tag{28}$$

Ce dernier état est différent du premier, et cette différence de phase relative entre le 0 et le 1 peut se mesurer expérimentalement par des méthodes interferométriques.

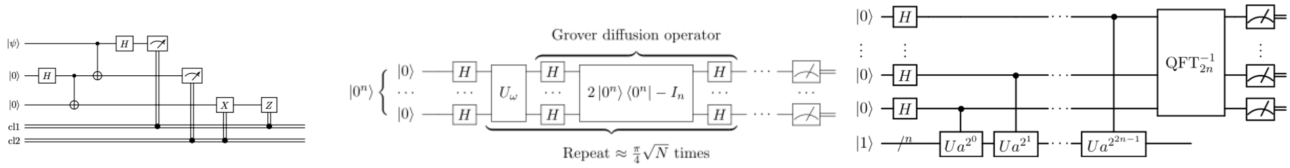

Figure 4: (De gauche à droite) Téléportation quantique (vu dans l'option "Technologies quantiques" en 2A), l'algorithme de Grover algorithme et l'algorithme de Shor, mentionné dans le cours 1.

Sur la Fig. 4, nous représentons les circuits quantiques d'algorithmes plus complexes, la teleportation quantique, l'algorithme de Grover et de Shor. Ces algorithmes n'impliquent non pas un seul mais plusieurs qubits, et cela est représenté par plusieurs lignes horizontales. On peut observer sur la Fig. 4 d'autres éléments non décrit: des opérations de mesure, des opérations conditionnelles, des échanges d'information classiques (deux traits horizontaux proches). Mais aussi des opérations d'intrication entre plusieurs qubits, qui sont modélisés par des barres noires verticales entre plusieurs lignes horizontales. Une introduction sur l'intrication quantique sera donnée dans le cours 6, qui joue un role central dans l'exécution d'algorithmes utilisant des ressources quantiques.

4 Exercices d'applications du cours

4.1 Produit scalaire et orthogonalité

Nous vous conseillons fortement de faire ses questions pour vous assurer d'avoir bien compris le cours et de savoir faire des calculs de bases utile en mécanique quantique.

Considérons un système quantique décrit par un espace de Hilbert de dimension 2. La base d'états pour ce système est décrit par $|0\rangle, |1\rangle$.
(1) Calculer le produit scalaire $\langle\phi|\psi\rangle$ où $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ et $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$. Que peut on en conclure?
(2) Soit P l'opérateur de projection $\hat{P} = |0\rangle\langle 0|$. Calculer $\hat{P}|\psi\rangle$.
(3) Vérifier que l'état $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|0\rangle - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}|1\rangle$. est bien normalisé.
(4) Considérons l'opérateur $\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$. Déterminer ses valeurs propres et ses vecteurs propres.
(5) Considérons l'opérateur unitaire $\hat{U}$ représenté sous la forme de matrice $\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$. Déterminer la matrice de l'opérateur $\hat{B} = \hat{U}A\hat{U}^\dagger$ où $\hat{U}^\dagger$ est la matrice conjuguée transposée de $\hat{U}$.

4.2 Commutateurs

Nous vous conseillons fortement de faire ses questions pour vous assurer d'avoir bien compris le cours et de savoir faire des calculs de bases utile en mécanique quantique.

Considérons encore $\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ et la matrice $\hat{B} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$.
(1) Calculer le commutateur $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.
(2) Déterminer si les matrices A et B sont hermitiennes.
(3) Soit l'opérateur C tel que $[\hat{A}, \hat{C}] = \hat{B}$. Déterminer la représentation matricielle de B.
(4) Soit A, B, C trois opérateurs montrer les identités suivantes:

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \tag{29}$$

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \tag{30}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger] \tag{31}$$

4.3 Fonction d'opérateurs

Supposons que l'on a une fonction f définie par un développement en série entière: $f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$, pour tout $|z| < R$. L'opérateur $f(\hat{A})$ est donné par:

$$f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{A}^n \tag{32}$$

Un cas important en mécanique quantique est l'exponentielle d'un opérateur - qui décrit notamment des opérations de déplacement:

$$\exp(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!} \tag{33}$$

(1) Soit $\hat{U}$ un opérateur unitaire. Montrer que $\hat{U}^\dagger f(\hat{A})\hat{U} = f(\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U})$.
(2) Montrer que $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$
(3) Soit $\hat{A}$ et $\hat{B}$ deux observables qui commutent avec $[\hat{A}, \hat{B}]$. Montrer que $[\hat{A}, f(\hat{B})] = [\hat{A}, \hat{B}]f'(\hat{B})$. On utilisera pour cela $[\hat{A}, \hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}]$ et $[\hat{A}^n, \hat{B}] = n\hat{A}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}]$ que l'on démontrera.

5 Autres propriétés mathématiques

Espace de Hilbert

Suite de Cauchy :

Une suite $\{x_n\}$ dans un espace de Hilbert est une suite de Cauchy si, pour tout nombre réel positif $\epsilon > 0$, il existe un indice N) tel que pour tous $m, n \geq N$, la distance entre les éléments x_m et x_n (mesurée avec la norme induite par le produit scalaire) est inférieure à ϵ $||x_m - x_n|| < \epsilon$.

Complétude :

Un espace de Hilbert est complet si chaque suite de Cauchy dans cet espace converge vers une limite qui est également dans l'espace. Plus formellement, si $\{x_n\}$ est une suite de Cauchy dans l'espace de Hilbert, alors il existe un vecteur x dans le même espace de Hilbert tel que : $\lim_{n\to\infty} ||x_n - x|| = 0$. En d'autres termes, les éléments de la suite se rapprochent arbitrairement d'une limite x à mesure que l'indice n tend vers l'infini.

Complet orthonormal: Si la collection de la combinaison linéaire finie du sous espace est dense dans $\mathcal{H}$. Un espace de Hilbert est dit séparable si il a un nombre dénombrable de sous espace, c'est à dire de sous-espace avec une relation de fermeture du l'espace entier.

ECOC

• Deux opérateurs qui commutent signifient que l'on peut trouver une base commune de vecteurs propres diagonalisant simultanément ces deux opérateurs. La réciproque est également vraie: s'il existe une base de vecteurs propres communs à $\hat{A}$ et $\hat{B}$ alors ces deux observables commutent.

Exemple: l'opérateur position et l'impulsion ne commutent pas (voir cours 7): on ne peut pas créer une base de vecteurs propres communs, car sinon cela voudrait dire que l'on peut mesurer simultanément la position et l'impulsion.