Dynamique et mesure de systèmes quantiques

N. Fabre*

April 5, 2024

Quantum mechanics do not occur in the Hilbert space, they occur in the laboratory. Asher Peres.

Dans ce cours, nous traitons de la description de la mesure en mécanique quantique :

- décrire un état quantique après une opération de projection
- décrire la probabilité de distribution mesurable expérimentalement

Ce sont deux aspects physiques différents, que nous illustrerons par un exemple pour la mesure de la polarisation de photons uniques. Nous serons amenés à bien distinguer les opérations unitaires des projecteurs, jusqu'à la détection elle-même. Ensuite, nous verrons comment décrire la **dynamique** d'un système quantique à l'aide de l'équation de Schrödinger.

1 Description de la mesure en mécanique quantique

1.1 Vers le concept de la mesure en mécanique quantique

Qu'est-ce qu'une mesure, ou plus précisément que voudrait-on que ce soit? On cherche un processus qui permette de déterminer une information sur le système quantique étudié : la valeur d'une grandeur physique. Idéalement, on voudrait qu'après la mesure cette valeur soit univoque, et que l'information soit pertinente. Comment réconcilier ce souhait avec la réalité physique du caractère probabiliste de la valeur des grandeurs physiques? Supposons qu'une grandeur physique A ait un ensemble de valeurs possibles $\{a_n\}$. Si l'on fait une mesure sur un système dans l'état $|\psi\rangle$, on a une certaine distribution de probabilité $P_{\psi}(a_n)$ de trouver l'une des différentes valeurs, selon l'état du système.

Est-ce que la nature se comporte vraiment de cette manière? Y a-t-il toujours des états $|\phi_n\rangle$ où la grandeur physique a une valeur déterminée, et l'état du système doit-il être changé par la mesure? On peut se poser la question inversement : quel sens une grandeur physique aurait-elle si elle n'avait jamais de valeur déterminée? Et pourrait-on parler de mesure pour un processus qui n'apporterait pas d'information sur le système?

On érigera donc cette nécessité en principe : une grandeur physique est caractérisée par un ensemble d'états où elle a une valeur déterminée ; et une mesure est un processus qui projette le système dans un de ces états. (Nous verrons ci-dessous que le verbe projeter est bien utilisé au sens mathématique du terme.) L'obtention d'une distribution de probabilité s'obtiendra à la suite de cette opération de projection et avec des détecteurs. Une opération de projection seule ne permet pas d'obtenir une distribution de probabilité: seul l'obtention de "click", d'absorption d'un photon sur le détecteur le permet.

1.2 Postulat de mesure

Un opérateur Hermitien $\hat{A}=\hat{A}^{\dagger}$ possède des valeurs propres réelles. À un opérateur Hermitien sera associée une observable, notée \mathcal{A} , une grandeur pouvant être mesurée expérimentalement. Ces grandeurs physiques "observables" sont, par exemple, le moment magnétique d'un spin 1/2, la polarisation de photons uniques, la position ou l'impulsion d'un électron non-relativiste, etc.

A partir de l'opérateur \hat{A} Hermitien, on peut construire une base orthonormée de vecteurs propres notées $\{|u_n\rangle\}$. Si on note a_n la valeur de \hat{A} dans l'état $|u_n\rangle$, alors on peut définir une observable par son action sur

^{*}nicolas.fabre@telecom-paris.fr

ces vecteurs de base:

$$\hat{A} |u_n\rangle = a_n |u_n\rangle$$

$$\hat{A} |\psi\rangle = \sum_n \hat{A} |u_n\rangle \langle u_n|\psi\rangle = \sum_n a_n |u_n\rangle \langle u_n|\psi\rangle$$

$$\hat{A} = \sum_n a_n |u_n\rangle \langle u_n|$$

où dans la deuxième ligne, on a introduit la résolution de l'identité $\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| = \mathbb{I}$, formé à partir des vecteurs propres d'une observable. Dans le cours précédent, on a déjà écrit une résolution de ce style, mais sans précision "physique".

Comment mesurer l'observable \mathcal{A} en pratique, c'est à dire comment projeter dans la base des états propres de \hat{A} ?

Le système quantique pénètre dans un dispositif de mesure (voir Fig.1), constitué d'opérations unitaires, de projecteurs et de détecteurs. L'effet conjoint de ces opérations logiques et des détecteurs permet de projeter le système quantique dans une base donnée, celle de l'observable définie intrinsèquement. À cette observable physique est associé un opérateur, dont ses vecteurs propres sont utilisés pour décomposer mathématiquement la fonction d'onde dans cette base.

Précisons un point. On notera que l'obtention expérimentale d'une probabilité ne se fera qu'au niveau de la détection : une probabilité est une information classique accessible à notre échelle, qui n'est obtenue que par la détection transformant l'information quantique en information classique. Cela se réalise en pratique par la conversion de photons et de photocourant. En d'autres termes, les détecteurs mesurent et détruisent l'état quantique, et nous donnent "macroscopiquement" de l'information sous forme de probabilité. Une projection de l'état peut se faire de différentes manières dépendamment du système quantique considéré. De plus, pour obtenir une distribution de probabilité, il faut synchroniser la source et le détecteur afin d'avoir le taux de répétition et de connaître le pourcentage de l'état quantique en sortie après traversée de l'opération projective.

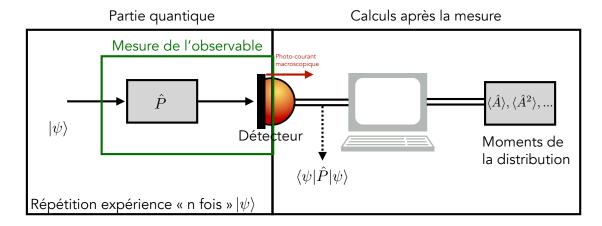


Figure 1: Exemple de la mesure d'une observable. Le système quantique est d'abord projeté \hat{P} puis ensuite absorbé (et donc détruit) par le détecteur. Un photocourant est mesuré et donne accès à la probabilité de mesurer l'état quantique.

Postulat de la mesure: Règle de Born

La mesure de l'observable \mathcal{A} ne peut donner comme résultat qu'une valeur propre de \hat{A} (a_n réels car \hat{A} est autoadjoint). Le résultat d'une mesure unique est aléatoire. Si on répète les mesures sur des systèmes préparés dans l'état $|\psi\rangle$, la probabilité de mesurer a_n est la valeur moyenne du projecteur:

$$\mathcal{P}_{\psi}(a_n) = ||\hat{P}_n |\psi\rangle||^2 = \langle \psi | \hat{P}_n |\psi\rangle = \text{Tr}\left\{|\psi\rangle \langle \psi | \hat{P}_n\right\}$$
(1)

avec $\hat{P}_n = |u_n\rangle \langle u_n|$. C'est la règle de Born. Décomposons. "La trace" indique que l'on a une moyenne quantique, obtenue par répétition de la mesure avec le même état. On trouve l'état quantique $|\psi\rangle \langle \psi|$ et la mesure, ici projective \hat{P}_n qui ont tous les deux ont un role aussi important l'un que l'autre. Alors que le système quantique est décrit par une fonction d'onde $|\psi\rangle$ normée à 1, la mesure est décrite par un projecteur $\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n$.

• Exemple 1: Si $|\psi\rangle$ est un état propre de \hat{A} avec pour valeur propre a_{n_0} , alors, $|\psi\rangle = |u_{n_0}\rangle$. Le projecteur sur l'état n s'écrivant $\hat{P}_n = |u_n\rangle \langle u_n|$, on obtient donc la probabilité correspondante:

$$\mathcal{P}_{\psi}(a_n) = \begin{cases} 1 & n = n_0 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$
 (2)

En effet, on a $\hat{P}_n |\psi\rangle = |u_n\rangle \underbrace{\langle u_n|u_{n_0}\rangle}_{\delta_{nn_0}}$. Le résultat est donc certain.

- Exemple 2 : Prenons un système à 2 niveaux (spin 1/2, polarisation de photons uniques, etc.), tel que $|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$. Admettons que l'on puisse effectuer l'opération de projection $P = |0\rangle \langle 0|$, alors en plaçant un détecteur par la suite, on obtient la probabilité suivante : $P(0) = \langle \psi | 0 \rangle \langle 0 | \psi \rangle = |\alpha|^2$: cela correspond à la probabilité du système d'être dans l'état 0. On mesure de manière sous-jacente la distribution de probabilité des vecteurs propres $|0\rangle, |1\rangle$ d'une observable.
- Exemple 3: Si la valeur propre est non dégénérée, et que $|\psi\rangle$ n'est pas vecteur propre de \hat{A} , la probabilité de mesurer a_n est donnée, après l'opération de projection par:

$$P(a_n) = || |u_n\rangle \langle u_n|\psi\rangle ||^2 \tag{3}$$

Alors que si la valeur propre est dégénéré, il faut sommer sur les vecteurs propres donnant cette même valeur propre:

$$P(a_n) = \left\| \sum_{i} \left| u_n^i \right\rangle \left\langle u_n^i \middle| \psi \right\rangle \right\|^2 \tag{4}$$

Dans ce cas, on ne doit pas raisonner sur des états individuels, mais sur les sous-espaces engendrés par les états correspondants aux mêmes valeurs.

Exemple de mesure de grandeur physique

A chaque système quantique physique, la méthode de mesure de grandeurs physiques est évidemment différente.

Energie: On peut mesurer les niveaux d'énergie d'un atome par spectroscopie, en étudiant la transmission optique du système ou par absorption pour différentes longueurs d'ondes. Le spectre en fréquence de photons uniques se mesure à l'aide d'un réseau suivi de détecteurs de photons uniques.

Position: mesurer la position par des méthodes optiques, écran et caméra (cf trous de young), microscope, diaphragme...

Impulsion: Mesure par effet Doppler pour des atomes. La mesure de la position en champ lointain (après les fentes) pour des électrons se trouve être une mesure de l'impulsion (cf transformée de Fourier).

1.3 Opération de projection

On regarde maintenant des éléments d'optiques permettant de projeter le système quantique dans une base donnée, mais le système quantique survit après celui-ci.

Fonction d'onde après une opération de projection

L'état quantique après une opération de projection peut s'écrire

$$|\psi\rangle_{\text{out}} = \frac{\hat{P}|\psi\rangle}{||\hat{P}|\psi\rangle||} \tag{5}$$

Le dénominateur est présent pour pouvoir normaliser à 1 le vecteur d'état. Juste avec le numérateur, on a un vecteur appartenant à un espace de Hilbert, mais pas une fonction d'onde d'un état quantique qui doit être normalisée à 1. Pour des opérations unitaires, on n'a pas besoin de ce numérateur, car la fonction d'onde est toujours normalisée à 1 après l'application d'une opération unitaire. C'est le postulat de la **réduction du paquet d'onde**. Une opération de projection physiquement est un filtre spatial (un trou), un filtre interférentiel, un polariseur...

On retrouve d'ailleurs au dénominateur la grandeur qui est obtenue au niveau de la mesure: projections et détecteurs.

Imaginons maintenant refaire la même mesure immédiatement après la première. Si le résultat devait être de nouveau probabiliste avec les mêmes $\mathcal{P}_{|\psi\rangle}(a_n)$, alors la première mesure n'aurait apporté aucune information. **Pour que la mesure ait un sens, l'état du système doit avoir changé.** Après la mesure, le système est dans un état $|\phi_k\rangle$ tel que $\mathcal{P}_{|\phi_k\rangle}(a_n) = \delta_{kn}$ de façon que la 2ème mesure donne avec certitude le résultat a_k .

Après cette opération de projection, on n'obtient pas directement la distribution de probabilité correspondante, il faut utiliser des détecteurs par la suite. Nous verrons un exemple dans la suite.

1.4 Valeur moyenne et écart type des observables

Une fois obtenue la distribution statistique des valeurs propres, on peut en déduire les valeurs moyennes et écart type de l'opérateur A par un calcul comme:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{n} a_n P_n(a_n) \tag{6}$$

$$\left[\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \, \hat{A} | \psi \rangle \right] \tag{7}$$

Quant à l'écart type (ou variance) de l'opérateur \hat{A} , notée $\text{Var}(\hat{A})$, elle est définie comme la différence entre la moyenne des carrés des valeurs propres et le carré de la moyenne :

$$Var(\hat{A}) = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \tag{8}$$

La valeur $\langle \hat{A}^2 \rangle$ est obtenue de manière similaire à la valeur moyenne, en remplaçant a_n par a_n^2 dans l'équation de la moyenne.

Pour bien comprendre comment mesurer une observable, nous allons traiter en détails du cas de la polarisation dans la prochaine section, et dans le cours 7 celui de la position d'un electron (non-relativiste).

2 Exemple: Polarisation de photon uniques

Pour mesurer la polarisation de photons uniques, on utilise généralement des polariseurs, des filtres interférentiels ou d'autres dispositifs optiques spécifiques. On fera attention à bien distinguer des opérations qui sont unitaires, d'autres projectives, voire jusqu'à la photodétection où le système quantique est absorbé et n'existe plus.

2.1 Effet de différents éléments optiques

[Effet d'un polariseur]

L'effet du polariseur se manifeste par la projection de l'état quantique du système correspondant à l'orientation du polariseur (voir Fig.2). Admettons que le polariseur est orienté horizontalement $\hat{P} = |H\rangle \langle H|$, alors la fonction d'onde en sortie du polariseur peut s'écrire:

$$|\psi\rangle_{\text{out}} = \frac{|H\rangle\langle H|\psi\rangle}{||H\rangle\langle H|\psi\rangle||} \tag{9}$$

En d'autres termes, le système quantique survit après cet élément dans l'état horizontal $|H\rangle$. Cela peut être interprété comme une mesure de la composante horizontale de la polarisation de l'état quantique du système:

mais pour effectuer effectivement la mesure, il faut placer des détecteurs dans la suite. C'est une opération active dans le sens où elle n'est pas réversible, et il y a perte d'énergie après la traversée (il y a absorption des photons qui sont polarisés verticalement). Si la mesure est non-destructive, on peut également dire dans un sens que l'on manipule l'état. La mesure va intrinsèquement modifier l'état quantique.

Lorsqu'un photon unique traverse ces éléments, la probabilité de détection à travers chaque configuration de polariseur permet de caractériser l'état de polarisation du photon. Cependant, on n'a pas accès à la probabilité de passage seulement avec un polariseur ; il faudra automatiquement un détecteur pour compter le nombre de "clicks" (voir juste après).

[Effet d'une lame d'onde]

A la différence d'un polariseur, les lames d'ondes sont décrites par des matrices unitaires. L'état en sortie d'une lame d'onde est donc décrit par:

$$|\psi\rangle_{out} = \hat{U}\,|\psi\rangle_{in} \tag{10}$$

Demi-onde: Une lame demi-onde est un dispositif optique qui introduit une différence de phase de π entre les composantes perpendiculaires de la lumière polarisée (classique ou photon unique) qui la traverse. C'est une opération unitaire. Ex: Si on considère un photon unique polarisé selon e_{θ} , alors $|\psi\rangle = \cos(\theta) |H\rangle + \sin(\theta) |V\rangle$. Alors, après la lame demi-onde $\hat{U}_{\lambda/2}$, $\hat{U}_{\lambda/2}$ $|\psi\rangle = \cos(\theta) |H\rangle - \sin(\theta) |V\rangle$. On a bien une rotation de π .

Quart d'onde: Une lame demi-onde est un dispositif optique qui introduit une différence de phase de $\pi/2$ entre les composantes perpendiculaires de la lumière polarisée qui la traverse. C'est une opération unitaire, permettant de transformer une onde polarisée rectiligne en elliptique, et permet la mesure de la polarisation circulaire droite ou gauche.

[Effet d'un cube séparateur de polarisation] Le cube séparateur de polarisation est un élément optique biréfringent permettant de séparer la composante verticale et horizontale d'un photon unique dans deux voies spatiales (voir Fig.2). La composante horizontale est réfléchie, alors que la verticale est transmise. C'est attesté expérimentalement par la mesure d'un click par un détecteur, et par rien sur l'autre voie. Le rien se définie par la présence d'un évènement, d'un click, dans l'autre voie. Le vide est un réel état quantique (au même titre qu'un photon unique, spin 1/2, etc), dont les conséquences de son existence sont nombreuses (émission stimulée, accélération de réactions chimiques en cavité optique...). Cela nous mène à des notions au delà du cours. Mais cette expérience "simple" nous mène déjà à définir cet état.

Le cube séparateur de polarisation est une opération unitaire agissant sur deux états en entrée, et donnent deux états en sortie:

$$\hat{U}\left|H\right\rangle_{a}\left|"vide"\right\rangle_{b}=\left|H\right\rangle_{c}\left|"vide"\right\rangle_{d},\ \hat{U}\left|V\right\rangle_{a}\left|"vide"\right\rangle_{b}=\left|"vide"\right\rangle_{c}\left|V\right\rangle_{d} \tag{11}$$

où a,b,c,d sont les voies spatiales de sortie. Dans cette précédente équation liant les états quantiques à l'entrée et la sortie, on a écrit $|H\rangle_c|"vide"\rangle_d$ qui signifie "présence d'un photon réfléchie dans la voie c" et "absence de photon transmis dans la voie "d". On exprime avec les mains la nécessité de décrire des systèmes quantiques composés de plusieurs sous-systèmes. Cela est décrit par un produit tensoriel $|H\rangle_c$ " $vide"\rangle_d = |H\rangle_c \otimes |"vide"\rangle_d$, qui sera décrit en détail lors de la sixième séance.

[Effet des détecteurs] Un détecteur de photon unique clique dès lors qu'un photon unique vient s'absorber sur sa surface: le système quantique ne survit plus, il n'y a pas de systèmes quantiques après une telle mesure destructrice. C'est la fin de la ligne pour le photon.

Le détecteur absorbe les photons uniquement dans sa bande spectrale de fonctionnement, et n'est pas sensible à la polarisation de celui-ci (il absorbe indépendamment de l'état de polarisation du photon unique). Comme il n'y a pas de résolution en polarisation, on somme sur toutes les probabilités possibles: alors la probabilité d'un "click" s'écrit:

$$P = |\langle H|\psi\rangle|^2 + |\langle V|\psi\rangle|^2 = 1 \tag{12}$$

qui par la normalisation de la fonction d'onde donne 1: le détecteur clique à chaque réception d'un photon unique, mais indépendamment de sa polarisation. Dès lors, comment obtenir des informations sur la polarisation du photon unique? Un détecteur seul non sensible à une polarisation particulière ne suffit pas.

Avec un combinaison astucieuse de polariseur, lame d'onde, cube séparateur de polarisation, que l'on peut déterminer l'état de polarisation du photon unique, et donc les probabilités associées à chacune de ses composantes. Il est important d'insister que ce n'est qu'au niveau de la détection que ces probabilités peuvent être déterminés, et c'est ce que l'on va voir après.

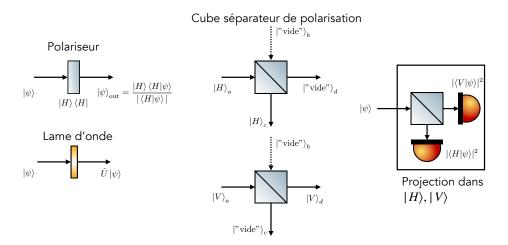


Figure 2: Présentation des différents éléments d'optiques modifiant la polarisation de photon unique. Observer bien la différence entre des opérations projectives et unitaires sur la fonction d'onde.

2.2 Obtention des histogrammes de polarisation

Pour obtenir un histogramme de la polarisation, on effectue une série de mesures répétées sur des photons uniques en plaçant un cube séparateur de polarisation suivi de détecteurs et en enregistrant le résultat de chaque mesure (voir Fig.3). Les données recueillies sont ensuite représentées sous forme d'histogramme, montrant la distribution statistique des résultats de mesure. Cet appareil de mesure, comprenant le cube séparateur de polarisation et deux détecteurs de photons uniques, permet d'obtenir, pour une fonction d'onde initiale $|\psi\rangle = \alpha |H\rangle + \beta |V\rangle$, les termes $|\alpha|^2$ et $|\beta|^2$, ce qui n'est pas la mesure totale de la fonction d'onde. La tomographie complète du photon unique polarisé est la mesure complète de la fonction d'onde, c'est-à-dire la détermination des coefficients complexes α, β , ce qui est une technique possible.

En effet, après le cube séparateur de polarisation, en commençant avec l'état $|H\rangle_a|"vide"\rangle_b$, on a en sortie l'état $|H\rangle_c|"vide"\rangle_d$. Un détecteur non sensible à la polarisation présent sur les voies spatiales c et d peut détecter un photon sur n'importe quelle polarisation, mais la présence du cube séparateur de polarisation impose la polarisation qui va être détectée.

On peut avoir du mal à voir le lien entre le postulat de mesure tel formulé dans la Sec.1 et celui de cet exemple. Mais de quels observables parle-t-on? En réalité, on mesure l'état dans la base des vecteurs propres des opérateurs de Stokes S_0, S_1, S_2, S_3 qui sont des observables de la grandeur physique polarisation. Ils sont définis en termes des composantes du champ électrique de la lumière dans différentes directions (voir Sec.C.1). Leurs vecteurs propres sont la polarisation horizontale et verticale du champ (avec des valeurs propres associées égales à 1).

- ♣ La mesure des probabilités des composantes de polarisation à 45 degrés et 135 degrés pourrait s'obtenir avec une lame demi onde placée avant le cube séparateur de polarisation. Pourquoi?
- \clubsuit Comment écririez vous la probabilité de mesurer des coincidences sur les voies c et d? En obtient t'on en pratique?

2.3 Séries de remarques

- Les éléments d'optique linéaire (miroir, lame séparatrice, etc...) permettent de modifier le champ électromagnétique qu'il soit classique (nombre de photons infinies) ou quantique (photons uniques).
- On peut encore se poser la question de la précision de la mesure : en pratique les mesures sont rarement parfaitement exactes, elles ont des intervalles de confiance, barres d'erreur, etc. Nous n'entrerons pas dans le détail de ces considérations, mais on peut modéliser une mesure non idéale par une projection dans un état qui n'est pas l'un des $|\phi_n\rangle$ mais une superposition de plusieurs $|\phi_n\rangle$.

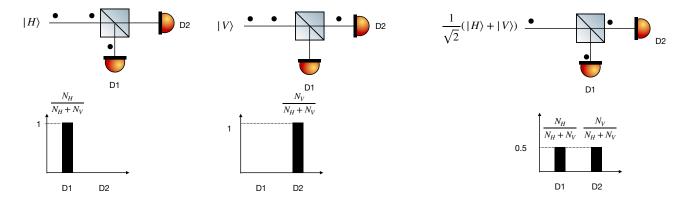


Figure 3: Obtention des histogrammes en polarisation pour différents états $|\psi\rangle = \alpha |H\rangle + \beta |V\rangle$. Pour obtenir un de ces histogrammes, nous devons préparer une séquence de photons uniques polarisés sur une durée d'acquisition donnée, provenant d'une source de photon unique dont on connaît les temps d'émission de celle-ci. Une synchronisation est nécessaire entre la source et la détection pour bien faire correspondre les événements. On mesure le nombre de fois que les détecteurs 1 et 2 ont cliqué, noté $N_{H,V}$ sur la figure, et divisé par le nombre total d'événements. Cela nous donne la probabilité de mesurer H (resp. V), soit $|\alpha|^2$ et $|\beta|^2$.

3 Description de la dynamique des systèmes quantiques

Dans cette section, nous procédons à la description de la dynamique de systèmes quantiques,

3.1 Equation de Schrondinger

Afin d'être prédictive, la physique quantique doit rendre compte de l'évolution dans le temps d'un système. On garde le même formalisme, mais les états $|\psi(t)\rangle$ et les fonctions d'ondes $\psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle$ sont maintenant fonctions du temps. De la même facon qu'en mécanique classique, on fixera un état initial $|\psi(t=0)\rangle$, et on a besoin d'une équation différentielle en $|\psi(t)\rangle$.

Postulat de la description de la dynamique de système quantique: Equation de Schrondinger

L'évolution ultérieure des systèmes quantiques isolé est décrit par l'équation de Schrondinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$
 (13)

 \hat{H} est une matrice unitaire, hermitienne, et ce n'est pas un projecteur. C'est une observable associée à l'énergie du système, appelé Hamiltonien. \hat{H} peut dépendre du temps, mais cela ne serait pas le cas dans ce cours.

Cette évolution permet de décrire l'évolution de systèmes quantiques quelque soit leur degré de liberté. Ce n'est pas seulement pour décrire la dynamique d'une particule massive coincé dans une boite (comme vu par certains en classe préparatoires). Si le système n'est plus isolé, mais en interaction avec l'environnement, une autre type d'équation est utilisé 'équation de Linbladien), au delà du cours. Des subtilités apparaissent également pour des systèmes relativistes (vitesse proche de celle de la lumière).

- L'objectif en mécanique quantique est de déterminer l'expression de l'Hamiltonien pour décrire la dynamique de systèmes quantiques complexes. On dit même qu'un théoricien ne comprend pas le système quantique dont il s'adresse sans son précieux Hamiltonien.
- \bullet \dot{H} doit être un opérateur linéaire pour conserver le principe de linéarité: que les combinaisons linéaires d'états du système soient aussi des états possibles, y compris lors de leur évolution dans le temps. On montre

que \hat{H} doit être hermitien pour préserver la normalisation des états:

$$\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = 1 \to \frac{d}{dt} \langle \psi|\psi\rangle = 0$$
 (14)

$$\rightarrow \left(\frac{d}{dt}\langle\psi|\right)|\psi\rangle = -\langle\psi|\left(\frac{d}{dt}|\psi\rangle\right) \tag{15}$$

$$\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^* \left\langle \psi \right| \hat{H}^{\dagger} \left| \psi \right\rangle = -\frac{1}{i\hbar} \left\langle \psi \right| \hat{H} \left| \psi \right\rangle \tag{16}$$

$$\rightarrow \langle \psi | \, \hat{H}^{\dagger} | \psi \rangle = \langle \psi | \, \hat{H} | \psi \rangle \tag{17}$$

et ce, pour tout état physique $|\psi\rangle$ normé. Par conséquent, on a bien $\hat{H}^{\dagger}=\hat{H}$ qui est bien une observable.

Pour pouvoir décrire cette évolution, il faudra en général diagonaliser l'Hamiltonien dans la base du vecteur d'onde initial. Dans la suite du cours, nous verrons différents exemples d'Hamiltonien: celui décrivant la dynamique de la molécule d'ammoniac, un electron non-relativiste, d'un spin 1/2...

3.2 Etats stationnaires et conservation de l'energie

Quelle est la grandeur physique correspondant à \hat{H} ? Notons E_n les valeurs propres de \hat{H} et $|\psi_n\rangle$ les vecteurs propres associés. Si on effectue une mesure de l'énergie, on ne peut trouver qu'une valeur propre E_n de \hat{H} , d'où une discrétisation de l'énergie.

Comme $|\psi_n\rangle$ est indépendant du temps, l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'exprime comme suit:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi_n | \psi(t) \rangle = E_n \langle \psi_n | \psi(t) \rangle.$$
 (18)

L'intégration de cette équation différentielle donne

$$\langle \psi_n | \psi(t) \rangle = \langle \psi_n | \psi(0) \rangle e^{-iE_n t/\hbar}. \tag{19}$$

On décompose une fonction d'onde dans la base constituée des vecteurs propres de l'observable énergie: $|\psi(t)\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|\psi(t)\rangle$, donc:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} \langle \psi_n | \psi(0) \rangle e^{-iE_n t/\hbar} | \psi_n \rangle.$$
 (20)

On peut également exprimer l'évolution temporelle de la fonction d'onde de manière plus compacte en introduisant l'opérateur d'évolution temporelle $\hat{U}(t,0)$:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,0) |\psi(0)\rangle , \ \hat{U}(t,0) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}.$$
 (21)

où on a retiré la relation de fermeture $\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = \mathbb{I}$. Ainsi, l'évolution temporelle d'une fonction d'onde dans le formalisme de la mécanique quantique est décrite par l'opérateur d'évolution temporelle $\hat{U}(t,0)$, qui est intimement lié à l'observable énergie \hat{H} . En pratique, l'objectif est de pouvoir appliquer $\hat{U}(t,0)$ à $|\psi(0)\rangle$, ce qui nécessite de diagonaliser \hat{H} . Ce point méthode sera vu lors de la cinquième séance.

3.3 Exemple direct et formel

- (1) Considérons l'opérateur $\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$. \hat{A} est t'elle une matrice Hermitienne? Déterminer ses valeurs propres, noté $\lambda_{1,2}$ et ses vecteurs propres.
- (2) Supposons que le système soit dans l'état $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$. Calculer la valeur moyenne de l'observable A dans cet état.
- (3) Si le système est préparé dans l'état $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|0\rangle \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}|1\rangle$, quel est la probabilité de mesurer la valeur propre λ_1 de \hat{A} ?
- (4) Si l'état du système est préparé à l'instant t=0 comme $|\psi(t=0)\rangle = |0\rangle$, trouver l'état $|\psi(t)\rangle$ à un temps ultérieur t: $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle$, où $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{A}t/\hbar)$.

3.4 Deuxième example: spin 1/2 dans un champ magnétique

Le terme "spin" est une analogie avec la rotation classique d'un objet, mais en réalité, le spin n'est pas une rotation au sens habituel. Il s'agit plutôt d'une propriété quantique qui décrit le moment angulaire intrinsèque des particules, une sorte de "rotation interne" propre à la mécanique quantique.

Un atome d'argent possède un moment magnétique $\vec{\mu}$ de spin 1/2 dont l'opérateur associé est

$$\hat{\vec{\mu}} = \gamma \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}} \tag{22}$$

où γ est le facteur gyromagnétique et l'opérateur vectoriel $\hat{\vec{\sigma}} = \hat{\sigma}_x \vec{u}_x + \hat{\sigma}_y \vec{u}_y + \hat{\sigma}_z \vec{u}_z$. Cette relation lie le moment magnétique au moment cinétique de la particule. Ce modèle permet de comprendre les propriétés intrinsèque de rotation d'un spin 1/2, ce qu'un modèle classique de l'electron ne parvient pas à décrire.

Un électron comme une charge étendue?

Prenons un modèle classique de l'electron comme une charge étendue, une énergie de masse m_ec^2 et comme une boule électrostatique r_c .

• Estimer la vitesse de cette électron. Cette vitesse est t'elle raisonnable? C'est une raison pour laquelle on conçoit que la mécanique classique nous permet pas de décrire convenablement un spin 1/2.

L'Hamiltonien d'évolution pour un spin 1/2 dans un champ magnétique externe peut être donné par :

$$\left(\hat{H} = -\vec{\mu}.\vec{B}\right) \tag{23}$$

 $\vec{\mu}$ est le moment magnétique du spin, \vec{B} est le champ magnétique externe. Cette expression correspond à la quantification de l'energie dipolaire magnétique, quantification uniquement de la matière via mathématiquement la "mise en chapeau" du moment magnétique. Une fois définie comme un opérateur, on est à même suivant les états quantiques produit, établir les valeurs moyennes et fluctuations de cette observable energie.

Pour un spin 1/2, le moment magnétique peut être exprimé en termes des matrices de Pauli :

$$\hat{\vec{\mu}} = \gamma \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}} \tag{24}$$

où γ est le facteur gyromagnétique, \hbar est la constante de Planck réduite et l'opérateur vectoriel $\hat{\vec{\sigma}} = \hat{\sigma}_x \vec{u}_x + \hat{\sigma}_y \vec{u}_y + \hat{\sigma}_z \vec{u}_z$. Ainsi, l'Hamiltonien d'évolution pour un spin 1/2 dans un champ magnétique externe peut être écrit comme :

$$\hat{H} = -\gamma \hbar \vec{B}.\hat{\vec{\sigma}} \tag{25}$$

En effectuant le produit scalaire entre le champ magnétique orienté selon z et l'opérateur vectoriel des matrices de Pauli dans l'espace des positions (attention pas dans un espace de Hilbert!) utilisant les matrices de Pauli, l'Hamiltonien peut être écrit comme :

$$\hat{H} = -\gamma \hbar B \hat{\sigma}_z \tag{26}$$

 $\hat{\sigma}_z$ est la matrice de Pauli correspondante à l'axe z.

L'évolution temporelle du système est donnée par l'opérateur d'évolution unitaire $\hat{U}(t)$, défini comme $\hat{U}(t) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right)$. Pour l'hamiltonien que nous avons, l'opérateur d'évolution devient :

$$\hat{U}(t) = \exp(i\omega t \hat{\sigma}_z). \tag{27}$$

Pour plus de détails sur l'exponentielle d'un opérateur, on pourra se référer à l'exercice facultatif du deuxième cours. C'est "seulement" une exponentielle d'une matrice, que l'on peut écrire comme une série entière. Si l'état initial du système est $|\psi(0)\rangle$, l'état du système à un instant ultérieur t est donné par $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle$. En utilisant l'expression de $\hat{U}(t)$, cela devient :

$$|\psi(t)\rangle = \exp(i\omega t \hat{\sigma}_z) |\psi(0)\rangle.$$
 (28)

L'évolution du système dans ce champ magnétique se traduit par une rotation du vecteur de spin autour de l'axe z dans l'espace de Hilbert. L'angle de rotation est proportionnel à l'amplitude du champ magnétique B

et à la durée de l'évolution t.

L'étape suivante est de trouver la méthode pour pouvoir appliquer l'opérateur unitaire d'évolution \hat{U} sur l'état initial afin d'en déterminer les états finaux. Nous verrons ceci lors de la cinquième séance, et un exemple guidée est aussi donné dans les exercices d'applications.

♣ L'étude du spin 1/2 dans un champ magnétique est très concret: cela permet de comprendre le principe de la résonance magnétique nucléaire, au coeur de l'imagerie médicale non invasive par exemple. A savoir qu'un nouveau design d'appareils d'IRM plus compact est le sujet de recherche actuel, avec la start-up française Chipiron https://www.chipiron.co/ par exemple.

3.5 Troisième example: electron non-relativiste

Prenons comme premier exemple un électron non-relativiste, qui correspond à l'électron porté par un atome d'hydrogène ou un électron libre (ou lié) au sein de couches semiconductrices.

L'hamiltonien d'un système quantique est l'opérateur défini par la même formule que l'énergie d'un système classique équivalent, en remplaçant les grandeurs physiques par les observables correspondantes. Pour un objet de masse m dans un potentiel \hat{V} , l'hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \hat{V} \tag{29}$$

où \hat{V} représente l'opérateur potentiel. Nous verrons des potentiels définis par morceaux en TD (séance 8), mais ce potentiel définit l'interaction Coulombienne. Ce sont des opérateurs avec des valeurs propres continues, qui nécessitent plus d'attention (voir 7ème séance).

A Exercice d'applications

A.1 Théorème d'Eherenfest

Le théorème d'Ehrenfest, formulé par le physicien autrichien Paul Ehrenfest au début du XXe siècle, établit un lien crucial entre les grandeurs classiques et les moyennes temporelles des observables quantiques dans le cadre de la mécanique quantique. Ce théorème permet de comprendre comment les propriétés classiques émergent à partir des équations fondamentales de la théorie quantique.

- (1) Ecrire l'équation de Schrondinger satisfaite par l'état du système $|\psi(t)\rangle$.
- (2) Obtenir alors l'équation d'Ehrenfest, régissant l'évolution temporelle de la valeur moyenne $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A}\rangle(t) = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{A}, \hat{H}]\rangle + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\rangle \tag{30}$$

Le premier terme du côté droit de l'équation d'Ehrenfest est associé à l'évolution unitaire du système, gouvernée par l'opérateur Hamiltonien. Le second terme reflète la dépendance explicite de l'observable par rapport au temps. Le théorème d'Ehrenfest est fondamental car il montre que, pour des systèmes quantiques suffisamment grands, les comportements statistiques des variables observables suivent les lois classiques de la physique. Ainsi, bien que les particules individuelles obéissent à des lois quantiques, les moyennes des observables macroscopiques convergent vers les prédictions classiques à mesure que le nombre de particules augmente.

Cette partie pourra être réaliser après la séance 7 sur les variables continues. On s'intéresse au mouvement d'une particule dans un potentiel à une dimension $V_0\hat{x}^n$.

- (3) Appliquer le théorème d'Ehrenfest aux opérateurs \hat{X} et \hat{P} et comparer aux équations classiques du mouvement.
- (4) Pour quel type de potentiels retrouve t'on ces mêmes équations?

A.2 Example: Spin 1/2

Dans cette section, on présente la description du spin 1/2 pouvant se décrire comme un système à deux niveaux, c'est à dire, une fonction d'onde appartenant à un espace de Hilbert dans un espace de dimension 2.

Décrivons à présent l'expérience de Stern et Gerlach représenté sur la Fig.4. Dans une enceinte à vide, un filament chauffe de la poudre d'argent. L'argent traverse un electroaimant, et sur un écran deux taches sont observés. Si l'argent ne possédait pas de spin, alors une seule tache centrale serait observé. Comme l'argent possède un spin 1/2, deux taches sont observés sur l'écran, qui correspond à la déviation des particules d'argent du au champ magnétique. Les particules d'argent ayant un spin orienté vers le haut seront déviées vers le haut, tandis que celles ayant un spin orienté vers le bas seront déviées vers le bas.

Un atome d'argent possède un moment magnétique $\vec{\mu}$ de spin 1/2 dont l'opérateur associé est

$$\hat{\vec{\mu}} = \gamma \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}} \tag{31}$$

où γ est le facteur gyromagnétique et l'opérateur vectoriel $\hat{\vec{\sigma}} = \hat{\sigma}_x \vec{u}_x + \hat{\sigma}_y \vec{u}_y + \hat{\sigma}_z \vec{u}_z$.

Le choix le plus adapté de la décomposition de la fonction d'onde correspond à celui dans lequel il va être mesuré. C'est aussi une manière de dire que comprendre un protocole de mécanique quantique est à la fois la description de l'état quantique et de la mesure. Dans notre cas, le moment magnétique \hat{M}_z est une observable et l'équation aux valeurs propres est donnée par:

$$\hat{M}_z |\pm\rangle = \pm \mu_B |\pm\rangle \tag{32}$$

Ces deux vecteurs propres forment une base complète, i.e $\mathbb{I} = |+\rangle \langle +|+|-\rangle \langle -|$, pour laquelle on peut décomposer la fonction d'onde dans cette base comme $|\psi\rangle = |+\rangle \langle +|\psi\rangle + |-\rangle \langle -|\psi\rangle$. Ainsi, pour un electron ayant un spin 1/2, la fonction d'onde s'écrit:

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle \tag{33}$$

Avec $\alpha = \langle +|\psi\rangle$ et $\beta = \langle -|\psi\rangle$ les amplitudes de probabilité correspondant aux vecteurs propres $|+\rangle$ et $|-\rangle$.

(1) Si on a deux taches sur l'écran (voir Fig.4), quel est l'état initial de la particule? Quel serait la prédiction de la tache sur l'écran à partir de la théorie classique?

- (2) Peut on obtenir l'état de spin inconnu d'un système avec un seul atome d'argent? Quel serait le protocole pour l'obtenir?
- (3) Comment calcule t'on la valeur moyenne d'une observable en mécanique quantique? Calculer la valeur moyenne de l'observable \hat{M}_z .

On place maintenant l'atome dans un champ magnétique suivant z, direction correspondante au choix de la base des vecteurs propres de $\hat{\sigma}_z$. L'Hamiltonien décrivant l'évolution du système quantique est décrit par:

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}}.\vec{B} \tag{34}$$

- (4) Développer l'expression de l'Hamiltonien et en déduire ces valeurs propres. L'atome est initialement préparé dans l'état $|\psi(t=0)\rangle = |+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_z + |-\rangle_z)$.
- (5) Ecrire l'état quantique à l'instant t. Une mesure du spin suivant x est effectué à l'instant t. Quel est la probabilité $P_{x+}(t)$ que le spin soit dans l'état $|+\rangle_x$?
- (6) Calculer la valeur moyenne de $\langle \mu_x(t) \rangle$. Commenter.

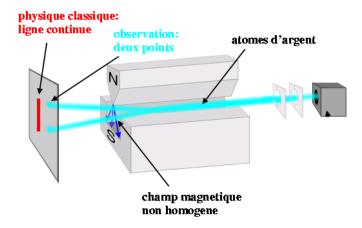


Figure 4: Expérience de Stern et Gerlach (image tiré de Wikipédia).

B Protocole BB84

Le fait que la mesure détruise l'état du système a des applications cryptographiques. Supposons que Alice et Bob veuillent partager un secret (typiquement une clé de chiffrement) en s'envoyant des objets quantiques dont l'état est ensuite mesuré : par exemple des photons polarisés transmis sur une fibre optique. Si un espion (Eve) intercepte ces photons et mesure leur polarisation, leur état est changé par la mesure ; même si Eve renvoie à Bob des photons dans l'état obtenu par Eve après sa mesure, il pourra s'agir d'un état différent de celui qui avait été choisi par Alice, et Alice et Bob peuvent faire en sorte de s'en rendre compte.

Le protocole BB84 (proposé comme son nom l'indique en 1984 par Bennett et Brassard) permet de générer une séquence binaire commune entre Alice et Bob, avec des contraintes physiques garantissant que celle-ci est secrète, ou alors que la communication peut avoir été espionnée et la génération doit avorter. Le principe central en est que Alice transmet des bits 0 ou 1 en les encodant sur l'état de polarisation des photons, mais en choisissant aléatoirement entre la base $\{|H\rangle, |V\rangle\}$ ($|H\rangle$ pour 0, $|V\rangle$ pour 1) et la base $\{|D\rangle, |A\rangle\}$ inclinée à ± 45 ($|D\rangle$ pour 0, $|A\rangle$ pour 1). C'est l'utilisation d'états non-orthogonaux utilisés pour encoder le même bit sur une base ou une autre, qui rend l'interception impossible à cacher : les lois de la physique quantique ne permettent pas de réaliser une mesure qui serait capable de distinguer des états non-orthogonaux sans faire d'erreur. Sans entrer dans les détails, le protocole est illustré figure 5 :

- Alice envoie une séquence de bits aléatoires matérialisée par la polarisation des photons successifs;
- Bob mesure la polarisation des photons en choisissant aléatoirement la base $\{|H\rangle, |V\rangle\}$ ou $\{|D\rangle, |A\rangle\}$; il obtient les mêmes bits qu'Alice pour les photons où la base de mesure est la même, et des bits aléatoires pour les autres ;
- Alice et Bob communiquent a posteriori (via un canal classique qui peut être public, et doit seulement être authentifié) les bases qu'ils ont utilisées pour chaque bit, ce qui leur permet de ne retenir que les bons ;
- une phase de post-traitement, en communiquant sur le canal classique, permet à Alice et Bob d'évaluer un éventuel taux d'erreurs (relié statistiquement à la quantité d'information qui pourrait avoir été espionnée) et, si ce dernier est suffisamment faible, distiller une clé finale identique et parfaitement secrète entre Alice et Bob.

Polariseurs d'Alice	\downarrow	\longleftrightarrow	7	\uparrow	7	7	~	\uparrow	7
Séquence de bits	1	0	0	1	0	0	1	1	1
Analyseurs de Bob	\leftrightarrow	X	\leftrightarrow	\leftrightarrow	X	X	$\qquad \qquad \longleftrightarrow$	\leftrightarrow	X
Mesures de Bob	1	1	0	1	0	0	1	1	1
Bits retenus	1	_	_	1	0	0	_	1	1

Figure 5: Cryptographie quantique (BB84) : transmission de photons polarisés entre Alice et Bob. Seuls ceux pour lesquels Bob a fait la mesure selon la même base qu'Alice seront retenus. Le fait de communiquer publiquement a posteriori la base choisie pour chaque photon ne révèle pas l'information du résultat de mesure, et arrive trop tard pour l'espion qui aurait intercepté les photons pour tenter d'en mesurer la polarisation.

On suppose qu'Eve peut intercepter un par un les photons émis par Alice, mesurer leur état de polarisation, et tenter de dissimuler sa présence en renvoyant à Bob des photons dans l'état qu'elle a détecté.

- (1) Supposons qu'Eve a intercepté un photon. Quelles mesures peut-elle faire pour déterminer si Alice a envoyé 0 ou 1?
- Elle doit choisir une base de mesure de la polarisation (ou un angle du polariseur) car elle ne sait pas si Alice a encodé avec les états $|H\rangle$, $|V\rangle$ ou $|D\rangle$, $|A\rangle$.
- (2) En supposant qu'Eve choisit les mêmes bases que l'aurait fait Bob, étudier tous les cas de figure de mesure qu'elle peut faire et donner les probabilités des différents résultats. On pourra faire une hypothèse sur l'état envoyé par Alice pour faire le raisonnement.
- Si Alice a envoyé $|H\rangle$ par exemple et qu'Eve mesure dans la base $|H\rangle$, $|V\rangle$, Eve obtient bien le message d'Alice, soit dans ce cas, 0. Si Eve choisit de mesurer dans la base $|D\rangle$, $|A\rangle$, alors elle obtient 0 ou 1 avec des probabilités égales à 1/2. Dans ce cas, elle a 50% de chances d'erreur.

- (3) Quelle est la probabilité pour qu'en mesurant le photon renvoyé par Eve, Bob obtienne la même valeur qu'Alice ?
- Si Eve a mesuré dans la bonne base, elle a renvoyé le bon état et Bob obtient le même résultat qu'Alice. Dans le cas contraire, qu'elle renvoie $|D\rangle$ ou $|A\rangle$ Bob a 50% de chances de ne va pas trouver le bon résultat. (On suppose ici que Bob mesure dans la même base qu'Alice puisque sinon, ils n'utilisent pas ce bit particulier et il n'intervient pas dans leur évaluation de l'erreur).
- (4) Alice et Bob choisissent au hasard un sous-ensemble de leur clé et le comparent publiquement. Comme Eve a une chance sur deux d'orienter son analyseur dans la bonne direction, quel pourcentage d'erreur Alice et Bob vont-ils enregistrer en présence d'un espion ?
- Alice et Bob vont enregistrer une différence dans 25 % des cas, bien pire que ce qu'on aurait pu espérer, et surtout qui ne permettra pas de garantir que la quantité d'information pouvant avoir fuité reste inférieure à celle partagée par Alice et Bob. Les bits seront donc inexploitables, le protocole avortera et, en supposant qu'Alice et Bob avaient dimensionné leur système pour fonctionner et peuvent vérifier qu'il n'est pas défaillant, ils pourront conclure qu'ils sont sur écoute.

Nota bene

Lors du cours de 2ème année intitulé "Technologies quantiques", nous verrons en détails ce protocole.

C Compléments

Ces compléments ne sont pas exigibles.

C.1 Opérateurs de Stockes

• Dans la plupart des cours de mécanique quantique, l'étude de la polarisation de photons uniques est souvent un des premiers exemples. On regrette cependant que leur traitement est inégal par rapport au spin 1/2 où à l'électron non-relativiste. Aucune explication sur le choix de la décomposition de la base des photons uniques comme provenant d'observables en polarisation, les opérateurs de Stockes, au même titre que l'observable position, de la magnétisation... La raison est physique et mathématique: l'écrire de ses opérateurs nécessite de quantifier le champ électromagnétique, une notion qui n'est pas abordé en première année d'introduction de mécanique quantique, mais de niveau M2.

Les opérateurs de Stokes sont utilisés pour décrire l'état de polarisation de la lumière. Ils sont particulièrement utiles dans le contexte de la polarimétrie, qui étudie les propriétés de polarisation de la lumière. Les quatre opérateurs de Stokes, souvent notés S_0 , S_1 , S_2 , et S_3 , sont définis comme suit :

1. Intensité totale (S_0) :

$$S_0 = \langle I \rangle = \langle E_x^2 \rangle + \langle E_y^2 \rangle$$

2. Polarisation linéaire horizontale (S_1) :

$$S_1 = \langle E_x^2 \rangle - \langle E_y^2 \rangle$$

3. Polarisation linéaire à 45 degrés (S_2) :

$$S_2 = 2\langle E_x E_y \rangle$$

4. Polarisation circulaire droite (S_3) :

$$S_3 = \langle I_R \rangle - \langle I_L \rangle$$

où I_R et I_L sont les intensités de la lumière polarisée circulairement à droite et à gauche respectivement. Ces opérateurs de Stokes fournissent une description quantitative complète de l'état de polarisation de la lumière. En particulier, pour une lumière entièrement polarisée, l'état de polarisation peut être complètement caractérisé par les valeurs des opérateurs de Stokes. Par exemple, une lumière complètement polarisée linéairement aurait $S_0 > 0$, $S_1 = S_2 = 0$, et $S_3 = \pm S_0$ en fonction de la direction de la polarisation linéaire.

On peut reexprimer ces intensités en terme d'observables de polarisation de mécanique quantique. Cela va au delà du programme du cours.

C.2 Mesures successives

Cette partie n'est pas présenté pendant la séance.

La probabilité de trouver un couple ordonnée (a_m, b_n) de résultats pour les mesures des grandeurs successives A et B sur un système décrit par sa fonction d'onde $|\psi\rangle$ vaut:

$$P(a_m, b_n) = ||\hat{Q}_n \hat{P}_m |\psi\rangle||^2 = \langle \psi | \hat{P}_m \hat{Q}_n \hat{Q}_n \hat{P}_m |\psi\rangle$$
(35)

En utilisant la propriété des projecteurs, on obtient: $\langle \psi | \hat{P}_m \hat{Q}_n \hat{P}_m | \psi \rangle$

Non-commutation des mesures: voir l'example sur la polarisation de photons uniques.

Si les opérateurs commutent, il existe une base de vecteurs propres communs donc $[\hat{P}_n, \hat{Q}_m] = 0$, et on a

$$P(b_m) = ||\hat{Q}_m |\psi\rangle||^2 \tag{36}$$

La mesure de A ne perturbe pas la mesure B qui suit.

Dans la configuration d'un polariseur et d'un analyseur croisés, nous avons deux éléments optiques essentiels dans une expérience de mesure de la polarisation de la lumière. Un polariseur agit comme un filtre qui laisse passer uniquement la lumière polarisée dans une direction spécifique, tandis qu'un analyseur, positionné perpendiculairement au polariseur, sert à analyser la composante de polarisation de la lumière qui atteint l'analyseur. Lorsque les deux polariseur et analyseur sont orientés de manière perpendiculaire l'un par rapport à l'autre, on dit qu'ils sont "croisés". Dans cette configuration, la lumière qui a une polarisation parallèle à l'axe du

polariseur est complètement bloquée par l'analyseur, et aucune lumière ne passe à travers le dispositif. Placer des détecteurs derrière le dispositif permet de mesurer l'intensité de la lumière qui parvient à traverser le polariseur et l'analyseur croisés. Ces détecteurs fournissent des informations quantitatives sur l'intensité lumineuse transmise à différentes orientations de polarisation. En ajustant progressivement l'angle entre le polariseur et l'analyseur, on obtient des données qui peuvent être utilisées pour caractériser la dépendance de l'intensité lumineuse par rapport à l'orientation de la polarisation.

D Correction

D.1 Théorème d'Eherenfest

- (1) $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$.
- (2) Prenons la dérivée de la valeur moyenne de \hat{A} . On a par la dérivée d'une composée:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \left(\frac{d}{dt}(\langle \psi(t) |) \hat{A} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{A} \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right)$$
(37)

En utilisant l'équation de Schrodinger, et également en la prenant selon son adjoint conjugué $-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | = \langle \psi | \hat{H}$, on a:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}\hat{A}|\psi(t)\rangle + \langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\hat{A}\hat{H}|\psi(t)\rangle$$
(38)

On reconnait alors le commutateur \hat{H} et de \hat{A} , et on en déduit l'équation demandé.

Si \hat{A} ne dépendait pas du temps, alors:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \tag{39}$$

(3) L'Hamiltonien pour une particule de masse m dans le puit de potentiel $\hat{V} = V_0 \hat{X}^n$ s'écrit: $\hat{H} = \hat{P}^2/2m + V_0 \hat{X}^n$ où $\hat{P}^2/2m$ représente l'Hamiltonien de la particule libre (dont les valeurs propres seront l'énergie cinétique de la particule).

On a: $[\hat{X}, \hat{H}] = \frac{1}{2m} [\hat{X}, \hat{P}^2]$. En utilisant l'identité [A, BC] = [A, B]C + B[A, C], we get $[\hat{X}, \hat{P}^2] = 2i\hbar \hat{P}$. Then, we obtain:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{X}\rangle = \frac{1}{m}\langle \hat{P}\rangle \tag{40}$$

Et $[\hat{P}, \hat{H}] = V_0[\hat{P}, \hat{X}^n] = n\hat{X}^{n-1}[\hat{P}, \hat{X}] = -in\hbar\hat{X}^{n-1}$ (voir séance précédente). On obtient finalement:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{P}\rangle = -nV_0\langle \hat{X}^{n-1}\rangle \tag{41}$$

Il suffit de dériver la première équation pour retrouver la seconde loi de Newton. On retrouve de manière générale les équations canoniques de Hamilton appliquées aux grandeurs moyennes.

D.2 Exemple: Spin 1/2

(1), (2), (3)

Lorsque le faisceau d'argent traverse le champ magnétique non uniforme, il est séparé en deux faisceaux distincts qui s'écartent l'un de l'autre et sont dirigés vers des régions différentes de l'écran. Ces faisceaux correspondent aux deux états de spin possibles pour les atomes d'argent dans ce champ magnétique. En observant la position des faisceaux sur l'écran, on peut déterminer la projection du spin des atomes d'argent le long de l'axe vertical.

Non, il n'est pas possible d'obtenir l'état de spin inconnu d'un seul atome d'argent à l'aide de ce dispositif, car la mesure du spin projette le système dans un état déterminé. Pour déterminer l'état de spin d'un atome d'argent inconnu, il faudrait effectuer plusieurs mesures sur un grand nombre d'atomes identiques ayant tous des états de spin aléatoires, puis en déduire la probabilité pour chaque état de spin possible.

On peut faire l'analogie avec l'expérience de la fente de Young avec des photons. Dans les deux cas, un faisceau est séparé en deux chemins possibles qui conduisent à des résultats différents sur un écran. Dans l'expérience de la fente de Young, les deux chemins sont déterminés par la diffraction des ondes lumineuses à travers deux fentes, tandis que dans l'expérience de Stern-Gerlach, les deux chemins sont déterminés par les deux états de spin possibles. Dans les deux cas, l'observation du résultat sur l'écran affecte le système et conduit à la projection du système dans un état déterminé.

(4) L'Hamiltonien s'écrit comme:

$$\hat{H} = -\gamma \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z \tag{42}$$

(5) L'état quantique à l'instant t s'écrit $|\psi(t)\rangle = \exp(-i\hat{H}t/\hbar) |\psi(t=0)\rangle$, soit:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\exp(-i\gamma t/2)|+\rangle_z + \exp(i\gamma t/2)|-\rangle_z)$$
(43)

On doit calculer $P_{x+}(t) = |\langle +|\psi(t)\rangle|^2$, soit:

$$P_{x+}(t) = \frac{1}{2} |\exp(-i\gamma t/2) + \exp(i\gamma t/2)|^2 = \frac{1}{2} \cos^2(\gamma t/4)$$
(44)

(6) La valeur moyenne s'écrit $\langle \hat{\mu}_x \rangle = \langle \psi(t) | \mu_x | \psi(t) \rangle$, soit:

$$\hat{\mu}_x |\psi(t)\rangle = \gamma \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} (\exp(-i\gamma t/2) |-\rangle_z + \exp(i\gamma t/2) |+\rangle_z)$$
(45)

Ainsi,

$$\langle \hat{\mu}_x \rangle = \langle \psi(t) | \hat{\mu}_x | \psi(t) \rangle = \gamma \frac{\hbar}{2} \frac{1}{2} (\exp(-i\gamma t) + \exp(i\gamma t)) = \gamma \frac{\hbar}{2} \cos(\gamma t)$$
 (46)

D.3 BB84

- (1) Supposons qu'Eve a intercepté un photon. Quelles mesures peut-elle faire pour déterminer si Alice a envoyé 0 ou 1 ?
- –[Elle doit choisir une base de mesure de la polarisation (ou un angle du polariseur) car elle ne sait pas si Alice a encodé avec les états $|H\rangle$, $|V\rangle$ ou $|D\rangle$, $|A\rangle$.]–
- (2) En supposant qu'Eve choisit les mêmes bases que l'aurait fait Bob, étudier tous les cas de figure de mesure qu'elle peut faire et donner les probabilités des différents résultats. On pourra faire une hypothèse sur l'état envoyé par Alice pour faire le raisonnement.
- -[Si Alice a envoyé $|H\rangle$ par exemple et qu'Eve mesure dans la base $|H\rangle$, $|V\rangle$, Eve obtient bien le message d'Alice, soit dans ce cas, 0. Si Eve choisit de mesurer dans la base $|D\rangle$, $|A\rangle$, alors elle obtient 0 ou 1 avec des probabilités égales à 1/2. Dans ce cas, elle a 50% de chances d'erreur.]-
- (3) Quelle est la probabilité pour qu'en mesurant le photon renvoyé par Eve, Bob obtienne la même valeur qu'Alice ?
- $-[Si \ Eve \ a \ mesuré dans la bonne base, elle a renvoyé le bon état et Bob obtient le même résultat qu'Alice. Dans le cas contraire, qu'elle renvoie <math>|D\rangle$ ou $|A\rangle$ Bob a 50% de chances de ne va pas trouver le bon résultat. (On suppose ici que Bob mesure dans la même base qu'Alice puisque sinon, ils n'utilisent pas ce bit particulier et il n'intervient pas dans leur évaluation de l'erreur).]-
- (4) Alice et Bob choisissent au hasard un sous-ensemble de leur clé et le comparent publiquement. Comme Eve a une chance sur deux d'orienter son analyseur dans la bonne direction, quel pourcentage d'erreur Alice et Bob vont-ils enregistrer en présence d'un espion ?
- –[Alice et Bob vont enregistrer une différence dans 25 % des cas, bien pire que ce qu'on aurait pu espérer, et surtout qui ne permettra pas de garantir que la quantité d'information pouvant avoir fuité reste inférieure à celle partagée par Alice et Bob. Les bits seront donc inexploitables, le protocole avortera et, en supposant qu'Alice et Bob avaient dimensionné leur système pour fonctionner et peuvent vérifier qu'il n'est pas défaillant, ils pourront conclure qu'ils sont sur écoute.]−