Les Bases Mathématiques de la Mécanique Quantique

Pierre Botteron [1], *Université de Toulouse.*

- **Einstein.** Einstein dévoile en 1905 l'aspect dual de la lumière [Ein05] : la lumière est à la fois corpusculaire (un ensemble de particules, les *photons*) et ondulatoire (une onde). Ceci est à la base de la mécanique quantique, et il a reçu un prix Nobel pour cela en 1921. Pourtant, il ne croyait pas que le fait de mesurer un état quantique modifie le système : « *Croyez-vous vraiment que la lune n'existe que quand vous la regardez ?* », et il ne croyait pas non plus que le résultat est complètement aléatoire, sans relation de cause à effet : « *Dieu ne joue pas aux dés* ». Avec ses collègues Podolsky et Rosen, il publie même dans un article en 1935 que c'est tellement absurde que ça impliquerait un gros paradoxe [EPR35] : une communication plus rapide que la vitesse de la lumière (selon lui...) ; il décrivait l'intrication quantique comme une « action effrayante à distance ».
- **Grosse découverte théorique.** En 1964, John Bell découvre théoriquement que les particules quantiques ne sont pas soumises aux lois de cause-à-effet de la mécanique classique [Bel64], et que donc certaines stratégies quantiques sont potentiellement meilleures que les stratégies classiques (les stratégies probabilistes).
- **Confirmation expérimentale.** Parmi d'autres scientifiques, le français Alain Aspect a vérifié expérimentalement ces résultats en 1982 [AGR82], et il vient de recevoir un prix Nobel en 2022 pour cela.

A. Qu'est-ce qu'un qubit ? Et un état quantique ?

- **Qubit.** Un qubit est la version quantique d'un bit (en anglais : « quantum bit »). Au lieu d'être simplement juste 0 ou 1, un qubit est un vecteur de norme 1 dans $\mathbb{C}^2$ (pour la norme euclidienne, la norme usuelle $||\cdot||_2$). Noter qu'il y a beaucoup plus de qubits que de bits possibles.
- **Notation de Dirac (1/3).** Dirac a inventé une notation pratique pour les qubits : par exemples, les vecteurs de la base canonique de $\mathbb{C}^2$ sont des qubits (puisque de norme $= 1$) et on les note $|0\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$ et $|1\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$. Ainsi, un qubit $|\psi\rangle$ peut s'écrire sous la forme $|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta|1\rangle$, où α et β sont des nombres complexes tels que $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.
- **Exemples connus de qubits.** $|+\rangle := \frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$ et $|-\rangle := \frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}$.

|1|. Site personnel : https://pierre-botteron.github.io/

Dernière modification : le 6 mars 2023.

- **État quantique.** On généralise la notion de qubit : un état quantique est modélisé par un vecteur de norme 1 dans un espace de Hilbert $\mathcal{H}$. (Rappel : un espace de Hilbert est simplement un espace vectoriel muni d'un produit scalaire et qui est complet. En dimension finie, tous les espaces vectoriels normés sont complets.) Un état quantique est aussi noté $|\psi\rangle$ avec la notation de Dirac. Remarque : un qubit est toujours un état quantique, en prenant $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$.
- **Superposition quantique.** Soit $\{|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle\}$ une base orthonormée (« BON ») de $\mathcal{H}$. Alors, un état $|\psi\rangle$ de $\mathcal{H}$ peut se décomposer dans la base : $|\psi\rangle = \alpha_1|e_1\rangle + \cdots + \alpha_n|e_n\rangle$, avec $\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{C}$. Dans ce cas, on dit que $|\psi\rangle$ est une superposition des états $|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle$, et sa probabilité d'être dans l'état $|e_i\rangle$ pour un certain i est modélisé par $|\alpha_i|^2$.

Exercice 1. (1) Montrer que les vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont bien des qubits.

(2) Trouver un coefficient $\alpha \in \mathbb{C}$ tel que le vecteurs $\frac{1}{3}|e_1\rangle + \frac{1}{4}|e_2\rangle + \alpha|e_3\rangle$ de $\mathbb{C}^3$ soit un état quantique. Ce coefficient α est-il unique ?

(3) Trouver une condition sur les $\alpha_i \in \mathbb{C}$ pour qu'une superposition quantique $|\psi\rangle = \alpha_1|e_1\rangle + \cdots + \alpha_n|e_n\rangle$ soit bien un état quantique.

B. Comment mesurer un état quantique ?

Dans la mécanique classique, on peut facilement mesurer la vitesse d'un objet, sa position, sa masse, etc... sans impacter le système. En d'autres termes, étant donné un système dans un certain état, on peut mesurer une quantité (une « observable ») sans trop causer de problème. Mais voyons ce qu'il se passe avec les états quantiques. Voir [Pel08, Section 1.1] pour plus de détails (en français en plus !). À partir de maintenant, on prend $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$.

- **Observable quantique.** L'observable quantique est modélisée par une matrice $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{C})$ telle que $A = A^*$, où A^* est définie comme la *matrice adjointe* de A (*i.e.* $A^* := \overline{A^\top}$). On dit qu'une telle matrice A est *auto-adjointe* (ou bien *Hermitienne*). L'observable est la quantité que l'on veut mesurer (par exemple, la vitesse d'une voiture dans le cas de la mécanique classique).

Théorème. *Une matrice carrée auto-adjointe est toujours diagonalisable en base orthonormée et ses valeurs propres $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ sont réelles. En d'autres termes, elle admet toujours des valeurs propres $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathbb{R}$ et des vecteurs propres associées $|v_1\rangle, \dots, |v_n\rangle$ qui forment une BON de $\mathcal{H}$.*

$\rightsquigarrow$ Dans ce cas-là, on a $A = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j Q_j$ où $Q_j \in \mathcal{M}_n(\mathbb{C})$ est une matrice qui projette orthogonalement un vecteur $|v\rangle \in \mathcal{H}$ sur l'espace vectoriel engendré par $|v_j\rangle$.
$\rightsquigarrow$ Pour éviter le problème des valeurs propres qui se répètent, on peut reformuler le théorème comme suit : toute matrice auto-adjointe A peut s'écrire sous la forme :

$$A = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i P_i \,, \qquad (\star)$$

où $k \leq n$, où les λ_i sont les valeurs propres de A deux-à-deux distinctes, et où les P_i sont les projections orthogonales sur les sous-espaces propres E_{λ_i}. Les matrices P_i sont appelées *projecteurs spectraux*.

- **Valeurs mesurables d'une observable.** Lorsque l'on mesure A, les différentes valeurs possibles que peut produire une observable A sont modélisées par les valeurs propres $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$ de A. Exemple : si l'observable A modélisait « le spin d'une particule », on aurait $\lambda_1 = 1$ qui modélise le « spin up », et $\lambda_2 = 0$ qui modélise le « spin down », et ce sont les deux seules valeurs mesurables de cette observable.
- **Mesurer la valeur d'une observable.** En reprenant les notations de ($\star$) du Théorème ci-dessus, on modélise la probabilité d'obtenir la valeur λ_i par :

$$\mathbb{P}\Big(\text{observer la valeur } \lambda_i \text{ d'une observable } A \text{ à partir d'un état } |\psi\rangle\Big) := \Big|\Big| P_i\,|\psi\rangle \Big|\Big|_2^2 .$$

- **Notation de Dirac (2/3).** On peut voir $\langle v_i|$ comme une application $\mathcal{H} \to \mathbb{C}$ qui à partir d'un vecteur $|\psi\rangle$ donne le nombre $\langle v_i, \psi\rangle \in \mathbb{C}$. Ainsi, à la place d'écrire $\langle v_i, \psi\rangle$, on peut plutôt noter $\langle v_i \,|\, \psi\rangle$, comme si l'on appliquait la fonction $\langle v_i|$ au vecteur $|\psi\rangle$.
- **Réduction du paquet d'ondes.** Il se passe un truc un peu mystérieux en mécanique quantique : quand on mesure un état, l'état change... C'est comme si, en mesurant la position d'une voiture, on déformait la voiture... Immédiatement après avoir mesuré l'observable A sur un état $|\psi\rangle$ et que l'on a obtenu une certaine valeur λ_i (pour un certain i), alors $|\psi\rangle$ devient automatiquement

$$|\widetilde{\psi_i}\rangle := \frac{P_i\,|\psi\rangle}{\Big|\Big| P_i\,|\psi\rangle \Big|\Big|} .$$

  Ce phénomène s'appelle la *réduction du paquet d'ondes*. De plus, ce qui est impressionnant, c'est que l'état est maintenant figé : si l'on mesure à nouveau l'observable A sur le nouvel état $|\widetilde{\psi}\rangle$, alors on obtiendra forcément la même valeur λ_i qu'avant, on n'a plus l'aspect aléatoire du résultat ni la superposition quantique comme avant.

Exercice 2. Vérifier que les matrices ci-dessous A_1, A_2, A_3 sont bien des observables quantiques, et calculer-en la décomposition comme dans ($\star$). En déduire les valeurs mesurées possibles de ces observables (ces valeurs doivent être des nombres réels si les calculs sont bons).

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & 2i-1 \\ -2i-1 & 3 \end{bmatrix}, \qquad A_2 = \begin{bmatrix} 3 & 5i & 2-i \\ -5i & 1 & 0 \\ 2+i & 0 & 1 \end{bmatrix}, \qquad A_3 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Dans le cas de l'observable A_1, calculer la probabilité de mesurer λ_1 et λ_2 lorsque l'état initial est $|\psi\rangle = |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{smallmatrix}1\\1\end{smallmatrix}\right]$, puis calculer le nouvel état $|\widetilde{\psi_i}\rangle$ obtenu après réduction du paquet d'onde pour chaque $i = 1, 2$.

Exercice 3 (Bonus)**.** Quand les valeurs mesurables λ_i sont deux-à-deux distinctes, montrer qu'on peut simplifier l'expression comme suit :

$$\mathbb{P}\Big(\text{observer la valeur } \lambda_i \text{ d'une observable } A \text{ à partir d'un état } |\psi\rangle\Big) = \Big|\langle v_i, \psi\rangle\Big|^2,$$

où $|v_i\rangle$ est un vecteur propre associé à λ_i.

C. Qu'est-ce que le produit tensoriel ?

Le produit tensoriel modélise la notion d'indépendance entre deux sous-systèmes (ou plus).

- **Produit tensoriel de matrices.** Aussi appelé *produit de Kronecker* (voir page Wikipedia). Si l'on a deux matrices $A \in \mathcal{M}_{m\times n}(\mathbb{C})$ et $B \in \mathcal{M}_{p\times q}(\mathbb{C})$, alors on définit une nouvelle matrice $A \otimes B \in \mathcal{M}_{mp\ \times nq}(\mathbb{C})$ par (avec la notation de matrice par blocs) :

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & \dots & a_{1n}B \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1}B & \dots & a_{mn}B \end{bmatrix}.$$

  Si l'on a des matrices A et B et des vecteurs v et w, alors $(A\otimes B)(v\otimes w) = (Av)\otimes(Bw)$.

- **Produit scalaire d'un produit tensoriel.** $\langle a \otimes b \,|\, c \otimes d\rangle := \langle a \,|\, c\rangle \langle b \,|\, d\rangle$.
- **Produit tensoriel d'espaces de Hilbert.** Si $\mathcal{H}$ et $\mathcal{H}'$ sont des espaces de Hilbert, alors $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ est un autre espace de Hilbert, définit comme l'espace vectoriel engendré par les produits tensoriels de vecteurs :

$$\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}' := \text{vect}\left\{|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle \,:\, |\psi\rangle \in \mathcal{H}, |\varphi\rangle \in \mathcal{H}'\right\}.$$

  Donc les éléments de $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ s'écrivent sous la forme $\sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$ pour certains $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}$, $|\varphi_i\rangle \in \mathcal{H}'$ et $\alpha_i \in \mathbb{C}$.
- **État intriqué.** Un état $|\Psi\rangle \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ est dit *séparé* s'il peut s'écrire sous la forme $|\Psi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$ avec $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ et$|\varphi\rangle \in \mathcal{H}'$. Si ce n'est pas possible, alors on dit que $|\Psi\rangle$ est *intriqué*. Exemple : l'état $|\Omega\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \otimes |1\rangle$ est intriqué car il ne peut pas se réduire sous la forme d'un état séparé.
- **Notation de Dirac (3/3).** L'état $|0\rangle \otimes |0\rangle$ est simplement noté $|00\rangle$, et de même l'état $|1\rangle \otimes |1\rangle$ est simplement noté $|11\rangle$. Ainsi, l'état intriqué ci-dessus se reformule en $|\Omega\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle$.
- **Puissance de l'intrication quantique.** L'état intriqué $|\Omega\rangle$ ci-dessus est composé de 2 particules : une dans $\mathcal{H}$ et une autres dans $\mathcal{H}'$. On en donne une à Alice et l'autre à Bob. Si Alice mesure sa particule et qu'elle obtient $|0\rangle$, alors on sait que Bob obtiendra aussi le même résultat s'il fait la même mesure de son côté sur sa particule : il obtiendra aussi $|0\rangle$, même s'il fait sa mesure instantanément après celle d'Alice.

Exercice 4. (1) Calculer $(A \otimes B)(u \otimes v)$ pour les matrices et vecteurs suivants :

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}, \qquad B = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 7+i \\ i & -1 & 2 \end{bmatrix}, \qquad u = \begin{bmatrix} 2i \\ -3 \end{bmatrix}, \qquad v = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

(2) En utilisant formule $||u||^2 = \langle u, u\rangle$ et la formule du produit scalaire ci-dessus, montrer que le vecteur $|\Omega\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle$ est bien un état quantique de $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ (cad qu'il est bien de norme $= 1$). Puis, prouver que cet état est intriqué.

D. Retour au jeu CHSH

...

Références

[**AGR82**] Alain Aspect, Philippe Grangier, and Gérard Roger. Experimental realization of einstein-podolsky-rosen-bohm gedankenexperiment : A new violation of bell's inequalities. *Phys. Rev. Lett.*, 49 :91–94, Jul 1982.
DOI : 10.1103/PhysRevLett.49.91.

[**Bel64**] J. S. Bell. On the einstein podolsky rosen paradox. *Physics Physique Fizika*, 1 :195–200, Nov 1964.
DOI : 10.1103/PhysicsPhysiqueFizika.1.195.

[**Ein05**] A. Einstein. Über einen die erzeugung und verwandlung des lichtes betreffenden heuristischen gesichtspunkt. *Annalen der Physik*, 322(6) :132–148, 1905.
DOI : 10.1002/andp.19053220607.

[**EPR35**] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete ? *Phys. Rev.*, 47 :777–780, May 1935.
DOI : 10.1103/PhysRev.47.777.

[**Pel08**] Clément Pellegrini. *Existence, unicité et approximation des équations de Schrödinger stochastiques.* Thesis, Université Claude Bernard - Lyon I, June 2008. Cette thèse a reçue le prix 2008 de la fondation EADS dans la section "mathématiques et leurs interactions".
PDF : https://theses.hal.science/tel-00334668/file/These_Clement.pdf.