Les concepts clés de la mécanique quantique

La présente fiche permet au profane complet d'acquérir une compréhension et connaissance des fondamentaux de la mécanique quantique. Son objectif est de fournir les outils nécessaires pour approcher le vaste monde de l'informatique quantique.

Changement de paradigme

Il existe une différence fondamentale entre la physique classique et la physique quantique, le déterminisme :

- en physique **classique**, une connaissance parfaite des conditions initiales d'un système permettrait une **prédiction exacte** de son évolution ;
- en physique **quantique**, il existe une part inhérente d'**aléatoire** dans tous les phénomènes.

Prenons l'exemple bien connu du chat de Schrödinger, nous allons nous permettre de légèrement le simplifier. L'énoncé est le suivant :

« *soit un chat dans une boîte parfaitement fermée et hermétique. Avec lui se trouve une fiole remplie d'un gaz extrêmement toxique qui le tuerait si elle était brisée. Un mécanisme aléatoire peut briser la fiole à tout moment. Tant que la boîte reste fermée, il est impossible de savoir si le chat est mort ou vivant.* »

En mécanique classique : le chat est soit mort, soit vivant. Pour chaque instant, il existe une probabilité qu'il soit dans un état ou dans l'autre. Ouvrir la boîte permet de connaître son véritable état, qui prend alors une probabilité 100%.

En mécanique quantique : le chat est ***et*** mort, ***et*** vivant. Pour chaque instant, il existe une probabilité qu'il soit dans un état ou dans l'autre, qui représente sa proportion de cet état comparée à l'autre. Ouvrir la boîte le force à prendre un état dans lequel il se trouve alors à 100%. C'est le concept de *superposition d'états*.

La fonction d'onde

Un formalisme clé à connaître est celui de la *fonction d'onde*, généralement notée ψ . Il s'agit d'une fonction attachée à une particule ou un système particulier. Elle prend en paramètre un vecteur dans l'espace des états (pour exemples : en position 3D : $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$; en spin* pour un électron : $\sigma = \left\{-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\right\}$), et renvoie une amplitude complexe.

(*) Le spin d'un électron est une de ses propriétés fondamentales. Il décrit son moment angulaire intrinsèque : il s'agit d'une propriété qui affecte la manière dont les particules interagissent et occupent l'espace. Il vaut soit ½ soit – ½, et est alors respectivement appelé spin up et spin down.

L'espace des états est un espace contenant l'intégralité des états d'un système. En fonction de ce que nous étudions, celui-ci peut être lié à la position d'une particule, par exemple en 3D : $\Omega = \mathbb{R}^3$, ou bien simplement correspondre au spin d'un électron : $\Omega = \left\{-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\right\}$.

Le carré du module de l'amplitude de la fonction d'onde renvoie à la probabilité lors d'une mesure pour la particule ou le système considéré de se trouver dans l'état passé en paramètre. Mis en équation, cela donne :

- dans le cas discret* :

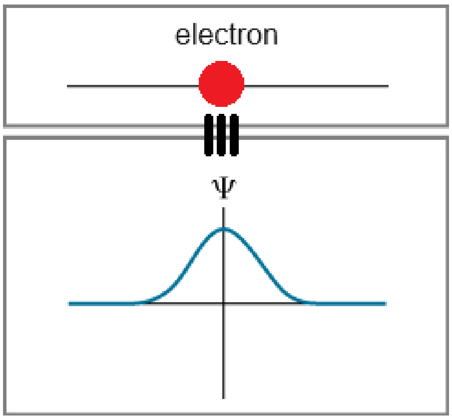
$$\mathbb{P}(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2 \quad , \quad \vec{r} \in \Omega \text{ espace des états}$$

- dans le cas continu* :

$$\mathbb{P}(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} \quad , \quad \vec{r} \in \Omega \text{ espace des états}$$

(*) l'intégrale de toutes les probabilités sur l'espace des états vaut systématiquement 1

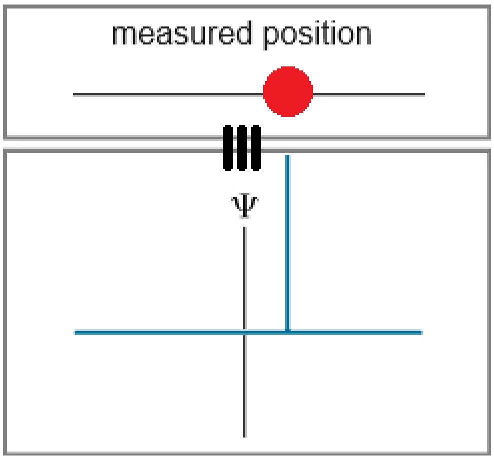
Prenons par exemple une fonction d'onde spatiale, liée à la position d'un électron le long d'un fil (cas 1D). Si celle-ci est nulle sur la totalité du fil mais possède une bosse en une zone donnée, on peut alors considérer qu'il s'agit de la position approximative de l'électron. Cela est représenté dans le schéma ci-dessous :



Il est très important de comprendre qu'à la manière du chat de Schrödinger, l'électron est en fait dans une *superposition de tous les états* dont l'amplitude par la fonction d'onde est non nulle. Dans le cas de notre exemple, cela signifie que l'électron se situe *effectivement à toutes les positions* pour lesquelles l'amplitude par la fonction d'onde est non nulle, ce dans des proportions dépendant de cette même amplitude. Seule une mesure viendra figer l'électron dans un unique état.

Effondrement de la fonction d'onde

Comme dans le cas du chat de Schrödinger, une mesure de l'état de la particule ou du système le forcera à prendre à 100% l'état effectivement mesuré. Le système perd toute superposition d'états. Cela est appelé l'« effondrement de la fonction d'onde ».



Si deux mesures sont menées en succession rapide (avant que la fonction ne recommence à s'étaler), alors elles donneront avec une certitude absolue l'exact même résultat.

Indéterminisme quantique

A la lumière de ce formalisme, nous pouvons développer l'introduction que nous avions fait de la physique quantique : « il existe une part inhérente d'aléatoire dans tous les phénomènes [quantiques] ».

Lorsque nous mesurons l'état de notre système, celui-ci prend aléatoirement l'un des états de l'espace des états. La probabilité dépend de la proportion des différents états dans leur superposition. Il est **strictement impossible** de prédire avec certitude quel état d'une superposition donnée sera obtenu. La fonction d'onde s'effondrera sur cet état de manière purement aléatoire, il n'y a aucun lien de causalité avec de quelconques événement antérieurs ou présents. Ces événements antérieurs et présents peuvent modifier la fonction d'onde, et ainsi modifier la probabilité d'obtenir tel ou tel état, mais ne peuvent pas forcer la mesure d'un état particulier (sauf à réduire la fonction d'onde à un seul et unique état, auquel cas il n'y a plus de superposition).

Contrairement à la physique classique déterministe, la mécanique quantique est *vraiment* aléatoire.

Notation en ket

Faisons maintenant un point de notation, qui vous sera utile dans le cadre de cette formation d'initiation à l'informatique quantique.

Pour un opérateur* donné, chaque espace des états peut être représenté par une famille d'états propres (équivalents à des vecteurs propres) orthogonaux et formant une base de l'espace des états.

(*) on appelle ici « opérateur » des endomorphismes unitaires agissant sur l'espace des états

Cela revient à choisir une base de l'espace des états dans laquelle la représentation matricielle de l'opérateur est diagonale.

Il est possible d'écrire toute fonction d'onde comme une combinaison linéaire de ces états propres.

Nous utilisons alors la notation en ket : $|\square\rangle$, pour représenter un état. Un ket est équivalent à un vecteur dans la base choisie : $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_n \end{pmatrix}$.

Exemple :

Prenons par exemple un opérateur de spin $\hat{\sigma}$ agissant sur un électron. Cet opérateur multiplie par 1 un spin up et par -1 un spin down.

***Attention**, nous parlons bien ici d'amplitude des états ; nous rappelons que les probabilités de mesure se basent sur le module de l'amplitude : il n'y a aucune modification des probabilités de mesure des états propres.*

Nous pouvons alors prendre $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$* comme base (respectivement : état de spin up, et état de spin down).

Certaines conventions noteront cette base $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle\}$, $|\alpha\rangle$ spin up, $|\beta\rangle$ spin down

On pourra alors écrire toutes les fonctions d'ondes de cet espace sous forme de ket et vecteur :

$$|\psi\rangle = x\,|\uparrow\rangle + y\,|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Il en va de même pour les opérateurs :

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Puisque nous sommes dans la base de l'opérateur $\hat{\sigma}$, celui-ci y est naturellement diagonal.

Dans certains cas, notamment dans les espaces des états continus, les vecteurs peuvent être infiniment longs, d'où l'avantage de l'écriture en ket.