

L'OPERATEUR DENSITE

La formulation la plus simple de la mécanique quantique repose sur le principe que l'on peut préparer un système donné dans un état décrit par un vecteur $|\psi\rangle$ de l'espace de Hilbert. Connaissant $|\psi\rangle$, nous pouvons alors calculer les probabilités de tous les résultats possibles d'une mesure donnée. De tels états sont appelés *états purs*. Cependant, il existe de nombreuses situations physiques pour lesquelles on ne peut pas disposer d'une connaissance complète de l'état du système. Les deux exemples qui suivent illustrent ce point.

Le premier exemple concerne un faisceau lumineux dépolarisé, de vecteur d'onde $\vec{k} = k\vec{u}_z$. De manière générale, pour caractériser l'état de polarisation d'un faisceau lumineux, on peut utiliser des combinaisons de polariseurs à deux voies et de lames à retard $\left(\frac{1}{4} \text{ d'onde}, \frac{1}{2} \text{ onde}\right)$. Rappelons qu'un polariseur à deux voies a la propriété suivante : si on oriente son axe selon x et qu'on envoie un faisceau polarisé suivant x , ce faisceau est complètement transmis par le polariseur. Si le faisceau est polarisé selon y , il est complètement défléchi lors de la traversée du polariseur. C'est l'équivalent d'une expérience de Stern et Gerlach.

Considérons donc un faisceau dépolarisé. Quand on place un polariseur à deux voies dans le plan xy , éventuellement précédé de lames à retard, quelle que soit l'orientation de ce polariseur, on trouve toujours que 50% des photons sont défléchis. Comment décrire l'état d'un photon dans cette situation ? Introduisons les deux états à un photon correspondant à une polarisation linéaire suivant x et selon y :

$$|\varepsilon_x\rangle \equiv a_{\vec{k}, \vec{u}_x}^\dagger |0\rangle \quad |\varepsilon_y\rangle \equiv a_{\vec{k}, \vec{u}_y}^\dagger |0\rangle \quad (1)$$

Qui forment une base de l'espace des états à un photon de vecteur d'onde $\vec{k} = k\vec{u}_z$. On peut alors chercher à décrire un état dépolarisé en prenant

$$|\psi_\theta\rangle = \cos\theta |\varepsilon_x\rangle + \sin\theta |\varepsilon_y\rangle \quad (2)$$

Pour $\theta = \frac{\pi}{4}$, ceci fournit bien une probabilité $\frac{1}{2}$ de transmission et de déflexion si l'axe du polariseur est aligné suivant x ou y . Mais cela n'est plus vrai dès qu'on tourne le polariseur : on se convainc facilement que ceci correspond à un photon polarisé linéairement selon la direction $\cos\theta\vec{u}_x + \sin\theta\vec{u}_y$. Les états de type (2) ne correspondent pas à une lumière dépolarisée. On peut augmenter la taille de la classe des vecteurs d'états considérés en utilisant des coefficients complexes et en introduisant par exemple les deux états :

$$|\sigma_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varepsilon_x\rangle + i|\varepsilon_y\rangle) \quad |\sigma_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varepsilon_x\rangle - i|\varepsilon_y\rangle) \quad (3)$$

Ces deux états ont effectivement la propriété de fournir une probabilité $\frac{1}{2}$ de transmission et de déflexion pour toute orientation d'un polariseur. Mais ils ne correspondent pas à une lumière dépolarisée. Si on place devant le polariseur une lame $\frac{1}{4}$ d'onde, qui introduit un

déphasage de $\frac{\pi}{2}$ entre les composantes selon x et y du champ électrique, alors on retrouve derrière cette lame un photon polarisé linéairement, décrit par (2) avec $\theta = \pm \frac{\pi}{4}$. Plus généralement, n'importe quelle combinaison de $|\varepsilon_x\rangle$ et $|\varepsilon_y\rangle$ avec des coefficients complexes correspond à un photon complètement polarisé (avec une polarisation en général elliptique, la polarisation linéaire (2) ou circulaire (3) étant des cas limites). En d'autres termes, il n'y a pas de place pour le désordre correspondant à une lumière dépolarisée dans une description du système en termes de vecteur d'état.

Le deuxième exemple concerne une mesure incomplète. Considérons un oscillateur harmonique à deux dimensions de pulsation ω . Supposons qu'on mesure son énergie et qu'on trouve le résultat $2\hbar\omega$. Quel est l'état du système après cette mesure ? Il n'y a pas de réponse unique à cette question, puisque $|n_x=1, n_y=0\rangle$ ou $|n_x=0, n_y=1\rangle$ ou n'importe quelle combinaison linéaire de ces deux états sont des choix possibles.

Par conséquent, il n'est pas toujours possible de définir de manière non ambiguë le vecteur d'état d'un système quantique. Nous devons remplacer cette notion par une autre formulation, plus générale, qui nous permettra de décrire des systèmes *mal préparés*, c'est-à-dire des systèmes pour lesquels toutes les quantités physiques associées à un ECOC n'ont pas été mesurées. Pour cela nous devons reformuler les principes de la mécanique quantique habituels en termes de *l'opérateur densité*. Nous commencerons par les cas particuliers où le système est effectivement décrit par un vecteur d'état. Dans ce cas, on dit que le système est dans un *état pur*. Nous passerons ensuite au cas général, correspondant par exemple aux deux exemples présentés ci-dessus, pour lesquels la description en terme de vecteurs d'état est impossible. Nous montrerons que la description en terme d'opérateur densité est bien adaptée à ces situations, qu'on qualifie de cas *impurs* ou *mélanges statistiques*. Nous donnerons quelques exemples d'application de l'opérateur densité, tels que la distribution de Wigner et la description de mesures effectuées sur des systèmes constitués de deux sous-systèmes intriqués et nous conclurons par une brève description de l'argument EPR.

1. Etats purs

1.1 Un outil mathématique : la trace d'un opérateur

Considérons un espace de Hilbert avec une base orthonormée $\{|n\rangle\}$ et un opérateur \hat{A} agissant dans cet espace. La trace de \hat{A} est définie par :

$$\text{Tr}(\hat{A}) = \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle \quad (4)$$

La quantité $\text{Tr}(\hat{A})$ ne dépend pas du choix de la base $\{|n\rangle\}$. Si on considère une autre base orthonormée $\{|\bar{n}\rangle\}$, on a :

$$\begin{aligned} \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle &= \sum_{n, \bar{n}, \bar{m}} \langle n | \bar{n} \rangle \langle \bar{n} | \hat{A} | \bar{m} \rangle \langle \bar{m} | n \rangle = \sum_{\bar{n}, \bar{m}} \langle \bar{n} | \hat{A} | \bar{m} \rangle \left(\sum_n \langle n | \bar{n} \rangle \langle \bar{m} | n \rangle \right) \\ &= \sum_{\bar{n}, \bar{m}} \langle \bar{n} | \hat{A} | \bar{m} \rangle \delta_{\bar{m}\bar{n}} = \sum_{\bar{n}} \sum_{\bar{n}, \bar{m}} \langle \bar{n} | \hat{A} | \bar{n} \rangle \end{aligned}$$

Où nous avons utilisé la relation de fermeture : $\sum_n |n\rangle\langle n| = \sum_{\bar{n}} |\bar{n}\rangle\langle \bar{n}| = \hat{1}$.

Une propriété importante de la trace est $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A})$ pour toute paire d'opérateurs \hat{A} et \hat{B} , que ces opérateurs commutent ou non :

$$\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \sum_n \langle n | \hat{A}\hat{B} | n \rangle = \sum_{n,m} \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle = \sum_m \langle m | \hat{B}\hat{A} | m \rangle = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A}) \quad (5)$$

Où nous avons utilisé la relation de fermeture.

Dans la suite, nous considérerons des opérateurs particuliers comme $\hat{A} = |\psi\rangle\langle\phi|$ où $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ sont deux états de l'espace de Hilbert. Dans ce cas, $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B})$ est simplement l'élément de matrice de \hat{B} :

$$\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \sum_n \langle n | (|\psi\rangle\langle\phi|) \hat{B} | n \rangle = \sum_n \langle n | \psi \rangle \langle \phi | \hat{B} | n \rangle = \langle \phi | \hat{B} | \psi \rangle \quad (6)$$

En particulier, si nous considérons $\hat{B} = \hat{1}$ et $|\psi\rangle = |\phi\rangle$, où $|\psi\rangle$ est un vecteur de norme 1, nous trouvons $\text{Tr}(|\psi\rangle\langle\psi|) = \langle\psi|\psi\rangle = 1$.

1.2. L'opérateur densité pour des états purs

Considérons un système dans l'état $|\psi\rangle$. Nous définissons l'opérateur densité $\hat{\rho}(t)$ de la manière suivante :

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \quad (7)$$

L'opérateur $\hat{\rho}$ est hermitien et correspond au projecteur sur l'état $|\psi\rangle$. A partir des principes de la mécanique quantique, nous pouvons déduire les propriétés suivantes :

• **1)** Si nous effectuons une mesure de la quantité physique A , correspondant à l'observable \hat{A} , la probabilité de trouver la valeur propre a_α est :

$$P(a_\alpha) = \left\| \hat{P}_\alpha |\psi\rangle \right\|^2 = \langle\psi | \hat{P}_\alpha | \psi\rangle$$

Où \hat{P}_α est le projecteur sur le sous-espace propre de \hat{A} correspondant à la valeur propre a_α . Cela peut s'écrire :

$$P(a_\alpha) = \text{Tr}(\hat{P}_\alpha \hat{\rho}) \quad (8)$$

En particulier, la valeur moyenne $\langle a \rangle = \langle\psi | \hat{A} | \psi\rangle$ est égale à :

$$\langle a \rangle = \text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho}) \quad (9)$$

• **2)** Immédiatement après la mesure donnant le résultat a_α , l'état du système est

$|\psi'\rangle = \frac{\hat{P}_\alpha |\psi\rangle}{\left\| \hat{P}_\alpha |\psi\rangle \right\|}$. L'opérateur densité correspondant est donc :

$$\hat{\rho}' = \frac{\hat{P}_\alpha \hat{\rho} \hat{P}_\alpha}{P(a_\alpha)} \quad (10)$$

• **3)** Notons $\hat{H}(t)$ l'Hamiltonien du système. Tant qu'aucune mesure n'est effectuée, l'évolution du système est donnée par l'équation de Schrödinger. L'opérateur densité vérifie donc :

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

Ce qui s'écrit aussi :

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)] \quad (11)$$

1.3. Formulation équivalente de la mécanique quantique pour des états purs

Nous pouvons maintenant formuler les principes de la mécanique quantique en terme de l'opérateur densité au lieu du vecteur d'état :

Premier principe : description des états d'un système. A tout système physique est associé un espace de Hilbert approprié \mathcal{E}_H . A tout instant t , l'état du système est complètement déterminé par un opérateur densité $\hat{\rho}(t)$. Cet opérateur est hermitien et satisfait la condition de normalisation $\text{Tr}(\hat{\rho}(t)) = 1$.

Cas particulier : Si le système est dans un état pur, $\hat{\rho}(t)$ a une valeur propre égale à 1 et toutes les autres valeurs propres sont nulles.

Deuxième principe : mesure de grandeur physique. Le principe concernant la mesure de quantités physiques est donné par (8) et (10).

Troisième principe : évolution dans le temps. L'évolution de l'opérateur densité est donnée par (11).

Remarquons que l'hypothèse concernant les valeurs propres de $\hat{\rho}(t)$ est équivalente à la formulation en termes de vecteur d'état $|\psi\rangle$. En effet $\hat{\rho}$ peut être diagonalisé puisqu'il est hermitien. La condition $\text{Tr}(\hat{\rho}(t)) = 1$ entraîne :

$$\sum_n \Pi_n = 1$$

Où les Π_n sont les valeurs propres de $\hat{\rho}$. Par hypothèse, toutes les valeurs propres de $\hat{\rho}$ sont nulles sauf une. Notons $\Pi_1 = 1$ la valeur propre non nulle et $|\psi\rangle$ le vecteur propre correspondant. Nous avons par construction $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$.

A ce stade, il semble que nous avons seulement compliqué la formulation des principes de la mécanique quantique, habituellement présentée en terme de vecteur d'état. Néanmoins, nous montrerons au paragraphe suivant que cette complication apparente permet de décrire des situations plus générales, correspondant aux états incomplètement préparés mentionnés dans l'introduction.

2. Mélanges statistiques

2.1. Le photon non polarisé

Une mesure de polarisation d'un photon impliquant des lames à retard suivies d'un polariseur à deux voies peut toujours s'interpréter comme la mesure de la projection de l'état

de polarisation $|\psi\rangle$ (inconnu) du photon sur un état déterminé par les orientations des lames et du polariseur :

$$|\theta, \varphi\rangle = \cos \theta |\varepsilon_x\rangle + e^{i\varphi} \sin \theta |\varepsilon_y\rangle$$

Avec la probabilité $P_+ = |\langle \theta, \varphi | \psi \rangle|^2$, le photon est transmis par le polariseur à deux voies. Avec la probabilité $P_- = 1 - P_+$, le photon est défléchi. Dans le premier cas, on dira que la mesure a donné le résultat +1, dans le second cas le résultat -1. On notera $\hat{P}_{\theta, \varphi}$ l'observable associée à cette mesure ; ses valeurs propres sont donc ± 1 , les états propres correspondant étant $|\theta, \varphi\rangle$ et $|\theta + \frac{\pi}{2}, \varphi\rangle$.

Revenons sur le faisceau lumineux considéré dans l'introduction. Le fait que le faisceau soit non polarisé s'écrit en termes mathématiques $\langle \hat{P}_{\theta, \varphi} \rangle = 0 \forall (\theta, \varphi)$. Nous avons indiqué en introduction qu'aucun vecteur d'état $|\psi\rangle$ ne permet de rendre compte de ce résultat. En revanche, il est facile de trouver l'opérateur densité correspondant, en supposant que (9) reste valable pour des mélanges statistiques :

$$\hat{\rho}_{non\ pol.} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hat{1} \quad (12)$$

Qui garde la même forme dans toute base orthonormée. En effet, on trouve dans ce cas :

$$\text{Tr}(\hat{P}_{\theta, \varphi} \hat{\rho}_{non\ pol.}) = \frac{1}{2} \text{Tr}(\hat{P}_{\theta, \varphi}) = 0$$

La signification suivante de (12) est la suivante. Dans la base $\{|\varepsilon_x\rangle, |\varepsilon_y\rangle\}$, l'opérateur densité s'écrit :

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} |\varepsilon_x\rangle \langle \varepsilon_x| + \frac{1}{2} |\varepsilon_y\rangle \langle \varepsilon_y| \quad (13)$$

Nous pouvons décrire le calcul de la valeur moyenne de n'importe quel opérateur \hat{A} de la manière suivante.

1. Supposons que le photon est dans l'état $|\varepsilon_x\rangle$ et calculons la valeur moyenne correspondante :

$$\langle a \rangle^{(x)} = \langle \varepsilon_x | \hat{A} | \varepsilon_x \rangle = \text{Tr}(\hat{A} |\varepsilon_x\rangle \langle \varepsilon_x|)$$

2. De même, supposons que le photon est dans l'état $|\varepsilon_y\rangle$ et calculons $\langle a \rangle^{(y)}$.

3. Moyennons les deux résultats avec des poids égaux :

$$\text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho}_{non\ pol.}) = \frac{1}{2} \langle a \rangle^{(x)} + \frac{1}{2} \langle a \rangle^{(y)}$$

Cette procédure est très différente de celle qu'on suivrait si le photon était dans un état pur de polarisation, par exemple $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\varepsilon_x\rangle + |\varepsilon_y\rangle)$. Dans ce cas, on devrait travailler avec des amplitudes de probabilités et des phénomènes d'interférences pourraient se produire puisqu'on partirait d'une superposition cohérente des états $|\varepsilon_x\rangle$ et $|\varepsilon_y\rangle$. Au contraire, pour un photon non polarisé, nous moyennons simplement les deux résultats associés aux deux états possibles $|\varepsilon_x\rangle, |\varepsilon_y\rangle$, comme on le ferait dans une description probabiliste classique. La situation décrite par (12) est souvent appelée *mélange incohérent*, par opposition avec la

superposition cohérente $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\varepsilon_x\rangle + |\varepsilon_y\rangle)$ pour laquelle l'opérateur densité s'écrit dans la base $\{|\varepsilon_x\rangle, |\varepsilon_y\rangle\}$:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (14)$$

Remarquons pour terminer que l'opérateur densité (13) peut également s'écrire :

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} |\sigma_+\rangle \langle \sigma_+| + \frac{1}{2} |\sigma_-\rangle \langle \sigma_-| \quad (15)$$

Un mélange à poids égal de polarisations linéaires orthogonales peut donc également s'interpréter comme un mélange à poids égal de polarisations circulaire gauche et circulaire droite.

2.2 L'opérateur densité pour un mélange statistique

Généralisons maintenant à un système quantique quelconque ce que nous venons de voir pour un photon non polarisé. Nous supposons que l'opérateur densité le plus général obéit aux propriétés suivantes :

Premier principe (suite). Cas général : L'opérateur densité est hermitien et satisfait la condition de normalisation $\text{Tr}(\hat{\rho}(t)) = 1$. Toutes les valeurs propres Π_i de $\hat{\rho}$ vérifient :

$$0 \leq \Pi_i \leq 1 \quad (16)$$

Les deuxièmes et troisièmes principes sont toujours décrits mathématiquement par (8), (9), (10) et (11).

L'interprétation physique de cette distribution est la suivante. Considérons une base propre $\{|\psi_i\rangle\}$ de $\hat{\rho}$; nous avons par définition :

$$\hat{\rho} = \sum_i \Pi_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$$

L'ensemble des nombres positifs Π_i peut être interprété comme une distribution de probabilité puisque $\text{Tr}(\hat{\rho}) = \sum_i \Pi_i = 1$. Le calcul de la valeur moyenne d'une grandeur physique

A s'écrit :

$$\langle a \rangle = \text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho}) = \sum_i \Pi_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle$$

Cela signifie qu'on peut d'abord calculer les différentes valeurs moyennes $\langle a \rangle^{(i)}$ en supposant que le système est dans l'état pur $|\psi_i\rangle$, puis moyennner les différents résultats $\langle a \rangle^{(i)}$ avec les poids statistiques Π_i .

Supposons qu'on réalise une expérience avec un système (par exemple un photon dont on mesure la polarisation) dont l'état correspond au mélange statistique $\hat{\rho} = \sum_i \Pi_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$.

Tout se passe comme si on disposait d'un état $|\psi_j\rangle$ choisit aléatoirement par un acteur extérieur parmi l'ensemble des états possibles $\{|\psi_i\rangle\}$. La probabilité pour que l'acteur choisisse $|\psi_j\rangle$ est Π_j . La séquence complète des mesures faites sur ce système particulier (par exemple grâce à une série de lames à retard et de polariseurs) doit être analysée comme

si le système était initialement dans l'état $|\psi_j\rangle$ et rien d'autre. Ensuite, la même séquence expérimentale réalisée une deuxième fois (avec un autre photon) correspondra à un autre état $|\psi_k\rangle$ des états propres de $\hat{\rho}$ et ainsi de suite.

Un mélange statistique est donc complètement différent d'un cas pur où le système se trouve dans une superposition cohérente, par exemple $|\psi\rangle = \sum_i \sqrt{\Pi_i} |\psi_i\rangle$. Dans ce dernier cas, en réalisant la même séquence expérimentale sur plusieurs systèmes tous préparés dans l'état $|\psi\rangle$, l'expérience permet de mettre en évidence les interférences entre les différentes amplitudes de probabilité $\sqrt{\Pi_i}$.

3. Exemples d'opérateurs densité

3.1. Les ensembles micro-canoniques et canoniques

Considérons un système pour lequel la seule information disponible est : *le système est avec certitude (i.e. une probabilité 1) dans un sous-espace \mathcal{F} de l'espace de Hilbert \mathcal{E}* . Par exemple, l'état de l'oscillateur harmonique mentionné dans l'introduction est dans le sous-espace de dimension 2 engendré par $\{|n_x=1, n_y=0\rangle, |n_x=0, n_y=1\rangle\}$ si une mesure de son énergie a donné le résultat $2\hbar\omega$.

Si la dimension de \mathcal{F} est strictement plus grande que 1, le système n'est pas dans un état pur et il doit être décrit par un opérateur densité. Nous postulons que cet opérateur est :

$$\hat{\rho} = \frac{1}{d} \hat{P}_{\mathcal{F}} \quad (17)$$

Où $\hat{P}_{\mathcal{F}}$ est le projecteur sur ce sous-espace. Introduisons une base orthonormée $|\psi_i\rangle$ ($i=1, \dots, d$) de \mathcal{F} ; l'opérateur densité s'écrit :

$$\hat{\rho} = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (18)$$

Ce choix, appelé *opérateur densité micro-canonique* est intuitif. Puisqu'on ne dispose d'aucune information concernant l'état particulier qui est occupé à l'intérieur de \mathcal{F} , nous attribuons une même probabilité à chaque état possible à l'intérieur de ce sous-espace. C'est une généralisation directe de ce que nous avons fait en (12) pour un photon non polarisé.

Ce principe est à la base de la physique statistique quantique. Il permet de construire l'ensemble canonique, qui décrit l'état d'équilibre d'un système \mathcal{S} en interaction faible avec un grand réservoir d'énergie. L'opérateur densité de \mathcal{S} est :

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}})} \quad (19)$$

Où β est relié à la température T du réservoir $\left(\beta = \frac{1}{k_B T}\right)$ et où \hat{H} est l'Hamiltonien de \mathcal{S} en l'absence de couplage avec le réservoir.

A partir de (19), on déduit en particulier la loi de Boltzmann. Considérons deux énergies E_n et E_m qui sont deux valeurs propres non dégénérées de \hat{H} . Dans une mesure

d'énergie, les probabilités respectives P_n et P_m de trouver les résultats E_n et E_m sont telles que

$$\frac{P_n}{P_m} = \exp\left(\frac{E_n - E_m}{k_B T}\right).$$

3.2. La distribution de Wigner d'une particule ponctuelle sans spin

Considérons une particule ponctuelle de masse m et de spin 0. L'opérateur densité $\hat{\rho}$ décrivant l'état de la particule peut être développé sur la base continue $\{|\vec{r}\rangle\}$ associée à l'opérateur position de la particule. Introduisons :

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \vec{r} | \hat{\rho} | \vec{r}' \rangle \quad (20)$$

Qui est une fonction complexe de \vec{r} et \vec{r}' . Les principes posés plus haut entraînent que la quantité $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$ est positive et qu'elle donne la probabilité de trouver la particule en \vec{r} (à d^3r près) :

$$d^3P = \rho(\vec{r}, \vec{r}') d^3r \text{ et } \int \rho(\vec{r}, \vec{r}') d^3r = 1$$

La distribution de Wigner $w(\vec{r}, \vec{p})$ de l'opérateur densité $\hat{\rho}$ est définie par :

$$w(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \rho\left(\vec{r} - \frac{\vec{u}}{2}, \vec{r} + \frac{\vec{u}}{2}\right) e^{i\vec{u}\cdot\vec{p}} d^3u \quad (21)$$

Où \vec{p} a la dimension d'une impulsion. Puisque $\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \rho^*(\vec{r}', \vec{r})$ cette quantité vérifie :

$$w(\vec{r}, \vec{p}) \in \mathbb{R} \quad : \quad \iint w(\vec{r}, \vec{p}) d^3r d^3p = 1 \quad (22)$$

La valeur moyenne d'une quantité physique dépendant seulement de la position $A(\vec{r})$ ou de l'impulsion $B(\vec{p})$ a une expression très simple en terme de la distribution de Wigner :

$$\langle a \rangle = \text{Tr}(A(\vec{r})\hat{\rho}) = \iint A(\vec{r}) w(\vec{r}, \vec{p}) d^3r d^3p \quad (23)$$

$$\langle b \rangle = \text{Tr}(B(\vec{p})\hat{\rho}) = \iint B(\vec{p}) w(\vec{r}, \vec{p}) d^3r d^3p \quad (24)$$

A partir de (22), (23) et (24) on pourrait être tenté de déduire que $w(\vec{r}, \vec{p})$ est la densité dans l'espace des phases pour la particule considérée, c'est-à-dire que $w(\vec{r}, \vec{p}) d^3r d^3p$ représente la probabilité de trouver la particule au point \vec{r} (à d^3r près). C'est bien sûr faux puisqu'une telle assertion n'a pas de sens dans le cadre de la mécanique quantique si $d^3r d^3p$ est plus petit que \hbar^3 . Par ailleurs, rien ne garantit que $w(\vec{r}, \vec{p})$ soit une quantité positive ; en fait, on peut aisément trouver des situations pour lesquelles $w(\vec{r}, \vec{p})$ est négatif dans certaines régions de l'espace des phases.

Supposons que la particule soit soumise au potentiel $V(\vec{r})$, de sorte que l'Hamiltonien est $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$. L'équation de mouvement de $w(\vec{r}, \vec{p}, t)$, déduite de (11) peut se mettre sous la forme :

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \nabla_r w = K[w] \quad (25)$$

Avec :

$$K[w] = \int N(\vec{r}, \vec{q}) w(\vec{r}, \vec{p} - \vec{q}, t) d^3q \quad (26)$$

Et

$$N(\vec{r}, \vec{q}) = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \left(V\left(\vec{r} - \frac{\vec{u}}{2}\right) - V\left(\vec{r} + \frac{\vec{u}}{2}\right) \right) e^{\frac{i\vec{u}\cdot\vec{q}}{\hbar}} d^3u \quad (27)$$

L'équation intégral-différentielle (25)-(26) est plus compliquée que son équivalent classique donnant l'évolution de la densité dans l'espace des phases. Dans le cas classique, on trouve l'équation de Liouville, qui a la même structure que (25) mais où (26) est remplacée par :

$$K[w]_{class.} = \nabla_r V \cdot \nabla_p w \quad (28)$$

Le fait que l'équation classique, qui est locale en \vec{r} et \vec{p} soit remplacée dans le monde quantique par une équation intégral-différentielle est une manifestation directe des propriétés quantiques. Par exemple, dans le problème du double puits, en raison de la non-localité de (27) vis-à-vis du potentiel $V(\vec{r})$, la particule localisée initialement dans le puits de gauche ressent l'existence du puits de droite et elle finit par l'atteindre après un certain temps.

Il y a deux cas où les évolutions classique et quantique coïncident, au moins de manière approchée :

1) Si le potentiel $V(\vec{r})$ varie linéairement ou quadratiquement avec la position, alors (26) et (28) sont égales. Considérons par exemple le potentiel harmonique isotrope $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$.

Le noyau $N(\vec{r}, \vec{q})$ vaut dans ce cas :

$$w(\vec{r}, \vec{p} - \vec{q}) \approx w(\vec{r}, \vec{p}) - (\vec{q} \cdot \nabla_p) w$$

En utilisant $\int N(\vec{r}, \vec{q}) d^3q = 0$ et $\int \vec{q} N(\vec{r}, \vec{q}) d^3q = -\nabla_r V$ nous obtenons $K[w] \approx K[w]_{class.}$. Pour que cette approximation soit correcte, il faut que la largeur en \vec{q} de N soit beaucoup plus petite que l'échelle d'impulsion Δp caractéristique de $w(\vec{r}, \vec{p})$. La variation en \vec{q} de N est directement reliée à la transformée de Fourier du potentiel $V(\vec{r})$. Par conséquent, si on note r_0 l'échelle typique de variation de $V(\vec{r})$, cette approximation est valable si $r_0 \gg \frac{\hbar}{\Delta p}$.

4. Systèmes intriqués

4.1. Opérateur densité réduit

Considérons un système \mathcal{S} formé de sous-systèmes \mathcal{A} et \mathcal{B} . L'espace de Hilbert associé à \mathcal{S} est $\mathcal{E}_{\mathcal{A}} \otimes \mathcal{E}_{\mathcal{B}}$. Notons $\{|\psi_n\rangle\}$ une base de $\mathcal{E}_{\mathcal{A}}$ et $\{|\phi_m\rangle\}$ une base de $\mathcal{E}_{\mathcal{B}}$.

Considérons l'opérateur densité $\hat{\rho}$ du système complet et définissons les opérateurs densité réduits $\hat{\rho}_{\mathcal{A}}$ et $\hat{\rho}_{\mathcal{B}}$ agissant respectivement dans $\mathcal{E}_{\mathcal{A}}$ et $\mathcal{E}_{\mathcal{B}}$:

$$\langle \psi_n | \hat{\rho}_{\mathcal{A}} | \psi_n \rangle = \sum_m \langle \psi_n; \phi_m | \hat{\rho} | \psi_n; \phi_m \rangle \quad \langle \phi_m | \hat{\rho}_{\mathcal{B}} | \phi_m \rangle = \sum_n \langle \psi_n; \phi_m | \hat{\rho} | \psi_n; \phi_m \rangle \quad (29)$$

Ces opérateurs densité réduits sont également appelés *traces partielles* de $\hat{\rho}$ sur \mathcal{B} et sur \mathcal{A} et ils sont notés $\hat{\rho}_{\mathcal{A}} = \text{Tr}_{\mathcal{B}}(\hat{\rho})$ et $\hat{\rho}_{\mathcal{B}} = \text{Tr}_{\mathcal{A}}(\hat{\rho})$.

On vérifie que $\hat{\rho}_A$ et $\hat{\rho}_B$ satisfont les propriétés d'un opérateur densité dans les espaces \mathcal{E}_A et \mathcal{E}_B . Ils sont tous deux hermitiens, de trace 1 puisque $\text{Tr}(\hat{\rho})=1$. De plus, pour tout projecteur \hat{P}_A sur un sous-espace \mathcal{E}_A , on trouve :

$$\text{Tr}(\hat{P}_A \hat{\rho}_A) = \text{Tr}((\hat{P}_A \otimes \hat{1}_B) \hat{\rho}) \geq 0$$

Où la dernière inégalité est la conséquence du fait que toutes les valeurs propres de $\hat{\rho}$ sont positives. On en déduit que toutes les valeurs propres de $\hat{\rho}_A$ sont également positives (et de même pour $\hat{\rho}_B$).

L'utilité de $\hat{\rho}_A$ et $\hat{\rho}_B$ apparaît quand on cherche à mesurer une grandeur physique associée à un des deux sous-systèmes seulement. Supposons qu'on s'intéresse à l'observable $\hat{A} \otimes \hat{1}_B$. La probabilité de trouver la valeur propre a_α de \hat{A} est (cf.8) :

$$\mathcal{P}(a_\alpha) = \text{Tr}((\hat{P}_\alpha \otimes \hat{1}_B) \hat{\rho}) = \text{Tr}(\hat{P}_\alpha \hat{\rho}_A)$$

En particulier, la valeur moyenne de A est $\langle a \rangle = \text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho}_A)$.

Pour résumer, quand une mesure est effectuée sur le sous-système A seulement, toutes les prédictions concernant cette mesure peuvent être faites à partir de l'opérateur densité réduit de $\hat{\rho}_A$.

4.2. Evolution d'un opérateur densité réduite

Supposons que le système \mathcal{S} soit isolé et que les deux sous-systèmes A et B n'interagissent pas entre eux. L'Hamiltonien total a donc la structure suivante :

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B \text{ où } \hat{H}_A = \hat{H}_A \otimes \hat{1}_B \text{ (resp. } \hat{H}_B = \hat{1}_A \otimes \hat{H}_B)$$

En utilisant le résultat général (11), nous obtenons :

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_A}{dt} = [\hat{H}_A, \hat{\rho}_A] \quad i\hbar \frac{d\hat{\rho}_B}{dt} = [\hat{H}_B, \hat{\rho}_B] \quad (30)$$

Si les deux sous-systèmes n'interagissent pas, chaque opérateur densité réduit $\hat{\rho}_A$ (resp. $\hat{\rho}_B$) évolue sous l'action de l'Hamiltonien du sous-système \hat{H}_A (resp. \hat{H}_B) uniquement.

Résumons les résultats obtenus jusqu'à présent : lorsqu'un système A est isolé pendant un intervalle de temps (t_i, t_f) , nous pouvons calculer les propriétés physiques de ce système (probabilités des différents résultats de mesure) en utilisant uniquement l'opérateur densité réduit de ce système à l'instant initial t_i et en déterminant l'évolution de cet opérateur $\hat{\rho}_A$ grâce à 30. Cela est valable même si A a interagité avec un autre système B (ou plusieurs autres) avant l'instant t_i et si le système total $A + B$ est dans un état intriqué à l'instant t_i . En revanche, c'est uniquement à partir de l'opérateur densité total $\hat{\rho}$ (et pas $\hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B$) que les corrélations entre les mesures effectuées sur A ou sur B peuvent être calculées de façon correcte.

5. Intrication non locale et paradoxe EPR

5.1. Les corrélations EPR

Une illustration des concepts qui précèdent est fournie par l'analyse du paradoxe EPR. Rappelons brièvement la nature de ce paradoxe, présenté ici dans la version de David Bohm de 1952, plus agréable à traiter mathématiquement que dans sa version initiale, tout en étant équivalente quant à ses implications conceptuelles.

Considérons un atome à trois niveaux. Les niveaux supérieur $|e\rangle$ et inférieur $|f\rangle$ ont un moment cinétique nul, alors que le niveau intermédiaire $|r\rangle$ (niveau relais) a un moment cinétique 1. Ce schéma correspond à la structure d'atomes alcalino-terreux, le calcium par exemple. Un atome initialement préparé dans l'état $|e\rangle$ va retomber sur le niveau $|f\rangle$ en émettant une paire (a, b) de photons. Le premier photon a a une énergie $\hbar\omega_a = E_e - E_r$ et le second une énergie $\hbar\omega_b = E_r - E_f$. Ces énergies sont différentes et la couleur des photons a et b est donc notablement différente (bleu et violet pour le calcium). On s'intéresse au cas où la paire de photons est émise suivant l'axe z . Grâce à des filtres colorés, on peut sélectionner les événements tels que le photon a se dirige vers Alice et le photon b vers Bernard.

Le moment cinétique total est conservé lors du processus d'émission. Comme les états atomiques de départ et d'arrivée ont un moment cinétique nul, la paire de photons a également un moment cinétique nul. On peut montrer qu'un photon polarisé circulairement $|\sigma_{\pm}\rangle$ porte un moment cinétique $\pm\hbar$ selon sa direction de propagation. On en déduit que le vecteur d'état de la paire de photons émise s'écrit :

$$|\Psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a:\sigma_+\rangle \otimes |b:\sigma_-\rangle + |a:\sigma_-\rangle \otimes |b:\sigma_+\rangle) \quad (31)$$

Ce qui peut encore s'écrire en revenant à la base de polarisation linéaire :

$$|\Psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a:\varepsilon_x\rangle \otimes |b:\varepsilon_x\rangle + |a:\varepsilon_y\rangle \otimes |b:\varepsilon_y\rangle) \quad (32)$$

Le photon a se dirige vers Alice, qui va effectuer une mesure de sa polarisation le long d'un axe de vecteur unitaire \vec{u}_a (figure 3.1) ; de même le photon b se dirige vers Bernard qui effectue une mesure de sa polarisation le long d'un axe de vecteur unitaire \vec{u}_b .

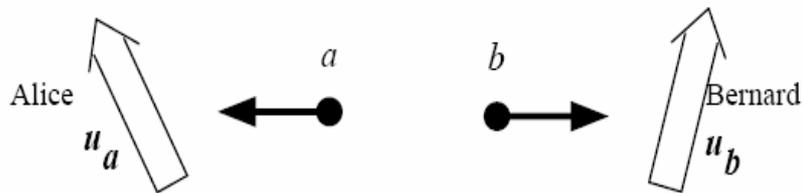


FIG. 3.1: Situation EPR : deux photons a et b sont préparés dans un état corrélé en polarisation. Le photon a se dirige vers Alice qui effectue une mesure de la composante de sa polarisation u_a . Le photon b se dirige vers Bernard qui mesure la composante de la polarisation selon u_b .

On convient de noter +1 le résultat de la mesure si le photon est transmis par le polariseur et -1 si le photon est réfléchi. Rappelons que si Alice oriente son polariseur selon x , un

photon $|\varepsilon_x\rangle$ sera transmis avec probabilité 1 (résultat +1) alors qu'un photon $|\varepsilon_y\rangle$ sera réfléchi avec probabilité 1 (résultat -1).

Les mesures d'Alice et de Bernard présentent de fortes corrélations. Supposons tout d'abord qu'Alice et Bernard choisissent tous les deux l'axe x pour effectuer leur mesure : $\vec{u}_a = \vec{u}_b = \vec{u}_x$. Avec une probabilité $\frac{1}{2}$, Alice et Bernard trouveront chacun +1 (transmission) ; toujours avec une probabilité $\frac{1}{2}$, ils trouveront chacun -1 (déflexion). En revanche, Alice et Bernard ne peuvent jamais obtenir des résultats différents. Il y a donc corrélation parfaite. Cette corrélation se généralise immédiatement à toute situation dans laquelle Alice et Bernard effectuent leur mesure selon un axe commun quelconque du plan xy . En effet le choix des axes xy permettant de passer de (31) à (32) est arbitraire.

5.2. Théories à variables cachées et inégalités de Bell

De telles corrélations ou anti-corrélations parfaites sont fréquentes dans la vie quotidienne. Supposons qu'on dispose de deux cartes, l'une rouge, l'autre jaune et qu'on les place chacune dans une enveloppe scellée. Après mélange, on donne une enveloppe à Alice, l'autre à Bernard. Quand Alice ouvre son enveloppe, elle découvre la couleur de sa carte, jaune avec une probabilité $\frac{1}{2}$ et rouge avec une probabilité $\frac{1}{2}$. Il y a évidemment une anti-corrélation parfaite avec le résultat ultérieur de Bernard ; si la carte d'Alice est rouge, celle de Bernard est jaune et réciproquement. Il n'apparaît aucun paradoxe dans ces corrélations : la couleur de la carte d'Alice et de celle de Bernard sont tirées au sort au moment du mélange des enveloppes et ce n'est pas le fait qu'Alice prenne connaissance de la couleur de sa carte qui détermine la couleur de la carte de Bernard.

On pourrait chercher une interprétation similaire des corrélations EPR, ce qui revient à raisonner en termes de *théories à variables cachées*. Dans le cadre de ces théories, supposées donner une description plus complète de la réalité que la mécanique quantique, il existe un paramètre (variable cachée), différent pour chaque paire, qui prédétermine le résultat de l'analyse Stern et Gerlach qui va suivre. L'existence de telles théories a été écartée par les tests expérimentaux (expériences d'Alain Aspect par exemple), au moins si on leur ajoute l'hypothèse de localité. On montre en effet que les prédictions de ces théories sont contraintes par certaines inégalités, appelées *inégalités de Bell*, alors que ces inégalités sont violées dans l'expérience (et par la théorie quantique).

5.3. Il n'y a pas de transmission supra-luminique !

Une fois convaincus que l'explication des corrélations EPR en termes de variables cachées n'est pas possible, nous pouvons revenir vers l'explication quantique. Supposons qu'Alice effectue sa mesure avant Bernard. Dans le formalisme quantique, on est amené à poser que lors de la mesure d'Alice de la polarisation de son photon selon l'axe x , l'état du système global est projeté de la manière suivante :

$$\text{Résultat d'Alice} = + \quad |\Psi_S\rangle \rightarrow |a; \varepsilon_x\rangle \otimes |b; \varepsilon_x\rangle \quad (33)$$

$$\text{Résultat d'Alice} = - \quad |\Psi_S\rangle \rightarrow |a; \varepsilon_y\rangle \otimes |b; \varepsilon_y\rangle \quad (34)$$

La mesure d'Alice affecte donc l'état du système global, en particulier sa composante sur l'espace des états de la polarisation du photon b . On peut donc se poser la question suivante : est-ce que la modification instantanée de l'état total du système induit une modification des propriétés que Bernard peut mesurer ? Si c'était le cas, cela correspondrait à une transmission d'une certaine information d'Alice vers Bernard, ce qui serait évidemment en contradiction avec le principe de relativité.

Heureusement, il n'en est rien, comme on peut le voir simplement. Tant que Bernard ne fait que des mesures portant sur le photon b , les prédictions portant sur ces mesures peuvent être calculées à partir de l'opérateur densité réduit de la polarisation du photon b :

- Avant qu'Alice effectue sa mesure, le système total étant dans l'état (32), cet opérateur densité réduit se calcule aisément et on trouve $\hat{\rho}_b = \frac{\hat{1}_b}{2}$. Pris séparément, le photon b apparaît donc complètement dépolarisé.

- Une fois qu'Alice a effectué sa mesure, l'opérateur densité de la polarisation du photon b est $|b:\varepsilon_x\rangle\langle b:\varepsilon_x|$ dans le cas (33) (probabilité $\frac{1}{2}$) et $|b:\varepsilon_y\rangle\langle b:\varepsilon_y|$ dans le cas

(34) (également probabilité $\frac{1}{2}$). S'il pense qu'Alice a effectué sa mesure, Bernard, ne connaissant pas le résultat de cette mesure, va prendre un opérateur densité pondérant ces deux éventualités, c'est-à-dire :

$$\frac{1}{2}|b:\varepsilon_x\rangle\langle b:\varepsilon_x| + \frac{1}{2}|b:\varepsilon_y\rangle\langle b:\varepsilon_y|$$

Ce qui n'est autre que $\frac{\hat{1}_b}{2}$.

En résumé, qu'Alice ait fait ou non une mesure, les prédictions que Bernard est capable de faire sur son sous-système, le photon b , sont inchangées et elles se font en prenant $\hat{\rho}_b = \frac{\hat{1}_b}{2}$.

Cela reste valable tant que Bernard n'a pas été informé du résultat d'Alice. Une fois qu'il a reçu d'Alice le résultat obtenu sur a , il peut bien sûr comparer avec son propre résultat et constater la corrélation parfaite. Mais cette information transite *a priori* par un canal respectant la relativité. Il n'y a donc pas de violation du principe de relativité engendré par le fait que la mesure d'Alice projette immédiatement l'ensemble du vecteur d'état. Ouf !

EXERCICES DE COMPREHENSION

1. Trace de $\hat{\rho}^2$: montrer que $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1$ et $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$ uniquement pour un état pur.

2. Evolution d'un état pur : En utilisant le résultat de l'exercice précédent et l'équation d'évolution (11), montrer qu'un état pur reste un état pur lors d'une évolution hamiltonienne.

3. Inégalités vérifiées par $\hat{\rho}$:

Montrer que $|\langle \psi | \hat{\rho} | \phi \rangle|^2 \leq \langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle \langle \phi | \hat{\rho} | \phi \rangle \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle$ orthogonaux.

4. Opérateur densité d'un spin $\frac{1}{2}$: Montrer que l'opérateur densité d'un spin $\frac{1}{2}$ peut

toujours s'écrire $\hat{\rho} = \frac{1}{2}(a_0 \hat{1} + \vec{a} \cdot \vec{\hat{\sigma}})$ où les $\hat{\sigma}_i$ ($i = x, y, z$) sont les matrices de Pauli et les quatre

nombre $a_0, a_i (i = x, y, z)$ sont réels. Déterminer les contraintes existant sur ces nombres. Calculer le spin moyen $\langle \hat{S} \rangle$ pour cet opérateur densité et retrouver les deux cas limites correspondant à un spin complètement polarisé et non polarisé.