La science quantique

Une vision singulière

VII) Formalisme:

Seconde partie

P.A. Besse

Mécanique de Lagrange et Hamilton

La mécanique quantique se base fortement sur
la formulation de Lagrange et Hamilton de la mécanique classique
(ex: crochets de Poisson → commutateurs)

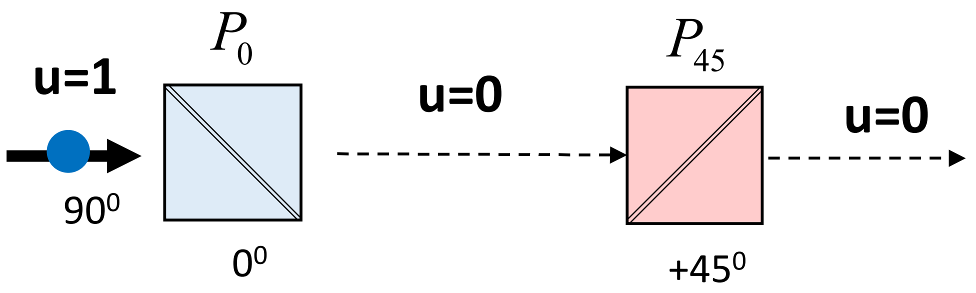
Littérature:

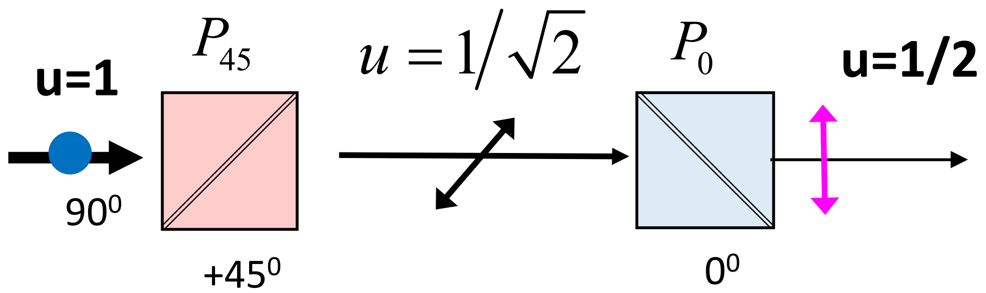
- **J-Ph Pérez «Mécanique: Fondements et applications, Chapitre 24», Disponible par e-book**
- **Patrick Hamill "A student's guide to Lagrangians and Hamiltonians", Disponible par e-book**
- **Léonard Susskind, Georges Hrabovsky "Le minimum théorique", Disponible par e-book**
- Léonard Susskind, Art Friedman «Mécanique quantique, le minimum théorique»

Commutateurs

(analogue quantique au crochet de Poisson classique)

Commutateur de deux opérateurs A et B: exemple: polarisation





$$P_{45} \cdot P_0 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

projecteurs

$$P_0 \cdot P_{45} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{P_0 P_{45} - P_{45} P_0 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \neq 0}$$

Les mesures de polarisation ne commutent pas. L'ordre des opérateurs est important !!
La mesure elle-même influence l'état

Commutateur de deux opérateurs A et B

$$\left[A,B\right]\equiv AB-BA$$

Exemple: position-impulsion

$$P_x X\cdot|\psi\rangle=\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)x\cdot|\psi\rangle=-i\hbar\cdot|\psi\rangle+x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\cdot|\psi\rangle=-i\hbar\cdot|\psi\rangle+X\,P_x\cdot|\psi\rangle$$

$$\left[X,P_x\right]\equiv i\hbar\cdot\mathbb{1}\qquad\left[Y,P_y\right]\equiv i\hbar\cdot\mathbb{1}\qquad\left[Z,P_z\right]\equiv i\hbar\cdot\mathbb{1}$$

Exemple: temps - énergie

$$E\,t\cdot|\psi\rangle=\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)t\cdot|\psi\rangle=i\hbar\cdot|\psi\rangle+t\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\cdot|\psi\rangle=i\hbar\cdot|\psi\rangle+t\,E\cdot|\psi\rangle$$

$$\left[t,E\right]\equiv -i\hbar\cdot\mathbb{1}$$

Exemples de commutateurs

Temps et lieu:

$$\boxed{[t,E] \equiv -i\hbar \cdot \mathbb{1}} \qquad \boxed{[X,P_x] \equiv i\hbar \cdot \mathbb{1}} \qquad \boxed{[Y,P_y] \equiv i\hbar \cdot \mathbb{1}} \qquad \boxed{[Z,P_z] \equiv i\hbar \cdot \mathbb{1}}$$

Polarisation:

$$\sigma_X \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_Y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_Z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{[\sigma_X,\sigma_Y] \equiv 2i \cdot \sigma_Z} \qquad \boxed{[\sigma_Y,\sigma_Z] \equiv 2i \cdot \sigma_X} \qquad \boxed{[\sigma_Z,\sigma_X] \equiv 2i \cdot \sigma_Y}$$

Moments cinétiques: $\vec{L} \equiv \vec{X} \times \vec{P}$

$$\boxed{[L_X,L_Y] \equiv i\hbar \cdot L_Z} \qquad \boxed{[L_Y,L_Z] \equiv i\hbar \cdot L_X} \qquad \boxed{[L_Z,L_X] \equiv i\hbar \cdot L_Y}$$

Théorème de Ehrenfest et évolution des moyennes

Rappel: mesure moyenne et équation de Schroedinger

Mesure moyenne de la valeur A:

$$\boxed{\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle}$$

Equation de Schroedinger:

$$\boxed{i\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H\cdot|\psi\rangle}$$

Exemple:

$$H = \frac{|\vec{P}|^2}{2m} + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V$$

PAB

Evolution de la moyenne d'un opérateur

$$\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right\rangle = \frac{1}{i\hbar} H \cdot \left|\psi\right\rangle \qquad H^{\dagger} = H \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\partial}{\partial t}\left\langle\psi\right| = -\frac{1}{i\hbar}\left\langle\psi\right| \cdot H$$

Evolution de la moyenne d'un opérateur de mesure A:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle A\right\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\left\langle\psi\right|A\left|\psi\right\rangle = \left\langle\frac{\partial}{\partial t}\psi\right|A\left|\psi\right\rangle + \left\langle\psi\right|\frac{\partial}{\partial t}A\left|\psi\right\rangle + \left\langle\psi\right|A\left|\frac{\partial}{\partial t}\psi\right\rangle$$

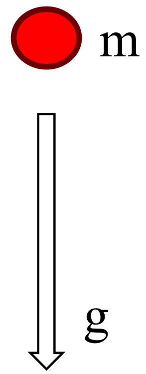
$$= -\frac{1}{i\hbar}\left\langle\psi\right|HA\left|\psi\right\rangle + \left\langle\psi\right|\frac{\partial}{\partial t}A\left|\psi\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\left\langle\psi\right|AH\left|\psi\right\rangle$$

Théorème d'Ehrenfest

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle A\right\rangle = \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[A, H\right]\right\rangle$$

Exemple: Chute libre 1D

$$H = \frac{P_Z^2}{2m} + mg \cdot z$$



Ehrenfest

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\langle A \rangle = \cancel{\left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle} + \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H] \rangle}$$

$$\boxed{[Z,P_Z] = i \cdot \hbar}$$

$$\boxed{[Z,P_Z^2] \equiv 2i\hbar \cdot P_Z}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle Z \rangle = \frac{1}{i\hbar} \cdot \frac{\langle [Z,P_Z^2] \rangle}{2m} = \frac{\langle P_Z \rangle}{m} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\langle P_Z \rangle = m \cdot \frac{\partial}{\partial t}\langle Z \rangle = m \cdot \langle v_Z \rangle}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle P_Z \rangle = \frac{1}{i\hbar} \cdot mg \cdot \langle [P_Z, Z] \rangle = -mg \quad \Rightarrow \quad \boxed{F \equiv \frac{\partial}{\partial t}\langle P_Z \rangle = -mg}$$

Solutions «classiques»

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\langle Z \rangle = \frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial t}\langle P_Z \rangle = -g \quad \Rightarrow \quad \boxed{a \equiv \frac{\partial^2}{\partial t^2}\langle Z \rangle = -g}$$

Loi de conservation

Théorème d'Ehrenfest

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle A\rangle = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H]\rangle$$

Si A ne dépend pas explicitement du temps t:

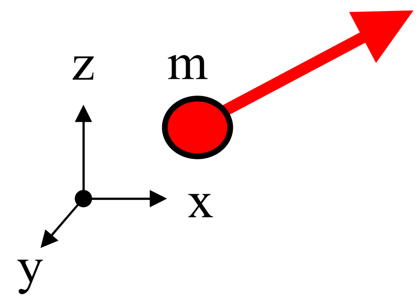
$$[A,H]=0 \qquad \Rightarrow \quad \langle A\rangle \text{ est conservée}$$

Loi de conservation

PAB

Exemple: électron en apesanteur

$$H = \frac{1}{2m}\left(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2\right)$$



$[P_X, H] = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle P_X \rangle$ est conservée

$[X, H] \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \langle X \rangle$ pas conservée

$[P_Y, H] = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle P_Y \rangle$ est conservée

$[Y, H] \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \langle Y \rangle$ pas conservée

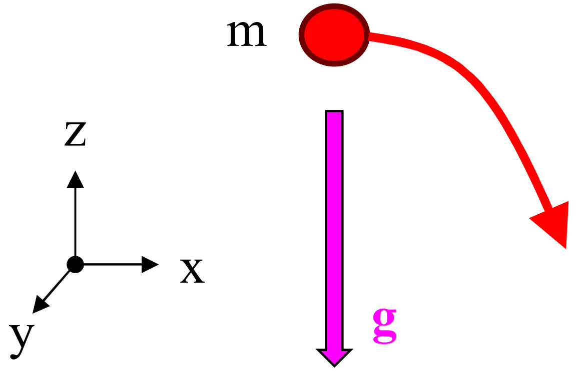
$[P_Z, H] = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle P_Z \rangle$ est conservée

$[Z, H] \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \langle Z \rangle$ pas conservée

Les moyennes se comportent comme en mécanique classique

Exemple: Chute libre 3D

$$H = \frac{P_X^2 + P_Y^2 + P_Z^2}{2m} + mg \cdot z$$



$$\left[P_X, H\right] = 0 \quad \Rightarrow \quad \left\langle P_X \right\rangle \text{ est conservée}$$

$$\left[P_Y, H\right] = 0 \quad \Rightarrow \quad \left\langle P_Y \right\rangle \text{ est conservée}$$

$$\left[X, H\right] \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \left\langle X \right\rangle \text{ pas conservée}$$

$$\left[P_Z, H\right] = mg \cdot \left[P_Z, z\right] = -i\hbar \cdot mg$$

$$\left[Y, H\right] \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \left\langle Y \right\rangle \text{ pas conservée}$$

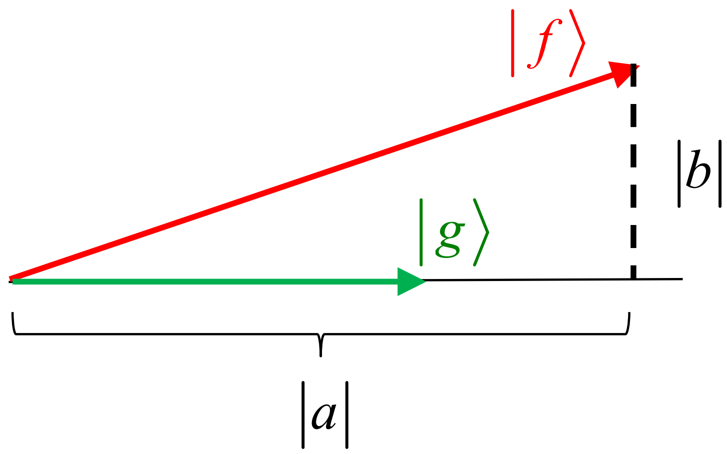
$$\left[P_Z, H\right] \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \left\langle P_Z \right\rangle \text{ pas conservée}$$

$$\left[Z, H\right] \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \left\langle Z \right\rangle \text{ pas conservée}$$

Les moyennes se comportent comme en mécanique classique

Incertitudes généralisées

Relation de Cauchy-Schwartz



Projection de f
sur le vecteur normé g

$$|a| = \frac{|\langle f||g\rangle|}{\sqrt{\langle g||g\rangle}}$$

Pythagore $$\langle f||f\rangle = |a|^2 + |b|^2 \geq |a|^2$$

$$\Longrightarrow \qquad \langle f||f\rangle \geq \frac{|\langle f||g\rangle|^2}{\langle g||g\rangle}$$

Cauchy-Schwartz

$$\langle f||f\rangle \cdot \langle g||g\rangle \geq |\langle f||g\rangle|^2$$

Incertitudes des opérateurs A et B

Incertitude sur A supposons $\left|f\right\rangle = \left(A - \left\langle A\right\rangle\right) \cdot \left|\psi\right\rangle$

$$\Delta A^2 = \left\langle f \middle| \middle| f\right\rangle = \left\langle \psi \middle| \left(A - \left\langle A\right\rangle\right)^2 \middle| \psi\right\rangle = \left\langle A^2\right\rangle - \left\langle A\right\rangle^2$$

Incertitude sur B supposons $\left|g\right\rangle = \left(B - \left\langle B\right\rangle\right) \cdot \left|\psi\right\rangle$

$$\Delta B^2 = \left\langle g \middle| \middle| g\right\rangle = \left\langle \psi \middle| \left(B - \left\langle B\right\rangle\right)^2 \middle| \psi\right\rangle = \left\langle B^2\right\rangle - \left\langle B\right\rangle^2$$

Incertitudes de Heisenberg généralisées

$$\left|\langle f \| g \rangle\right|^2 = \left(\frac{\langle f \| g \rangle + \langle g \| f \rangle}{2}\right)^2 + \left(\frac{\langle f \| g \rangle - \langle g \| f \rangle}{2i}\right)^2 \geq \left(\frac{\langle f \| g \rangle - \langle g \| f \rangle}{2i}\right)^2$$

$$\langle f \| g \rangle - \langle g \| f \rangle = \langle \psi | (A - \langle A \rangle) \cdot (B - \langle B \rangle) | \psi \rangle - \langle \psi | (B - \langle B \rangle) \cdot (A - \langle A \rangle) | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | AB | \psi \rangle - \langle \psi | BA | \psi \rangle = \langle [A, B] \rangle$$

<u>**Cauchy-Schwartz**</u> $\quad \langle f \| f \rangle \cdot \langle g \| g \rangle \geq \left|\langle f \| g \rangle\right|^2$

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \cdot \left|\langle [A, B] \rangle\right|}$$

<u>**Incertitudes de Heisenberg généralisées**</u>

Exemples d'incertitudes

Temps et lieu:

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta X \cdot \Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta Y \cdot \Delta P_y \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta Z \cdot \Delta P_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

Polarisation:

$$\Delta \sigma_X \cdot \Delta \sigma_Y \geq \left| \langle \sigma_Z \rangle \right|$$

$$\Delta \sigma_Y \cdot \Delta \sigma_Z \geq \left| \langle \sigma_X \rangle \right|$$

$$\Delta \sigma_Z \cdot \Delta \sigma_X \geq \left| \langle \sigma_Y \rangle \right|$$

Moments cinétiques:

$$\Delta L_X \cdot \Delta L_Y \geq \frac{\hbar}{2} \left| \langle L_Z \rangle \right|$$

$$\Delta L_Y \cdot \Delta L_Z \geq \frac{\hbar}{2} \left| \langle L_X \rangle \right|$$

$$\Delta L_Z \cdot \Delta L_X \geq \frac{\hbar}{2} \left| \langle L_Y \rangle \right|$$

Base commune et commutateurs

Base commune d'opérateurs

$$\left[A, B\right] = 0$$

$$\Downarrow$$

A et B ont une base commune de vecteurs propres

Ils n'ont pas nécessairement les mêmes valeurs propres

Exemple:
Atome d'hydrogène

Schroedinger: $E \cdot |\psi\rangle = H \cdot |\psi\rangle$ *avec* $H = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \right)$

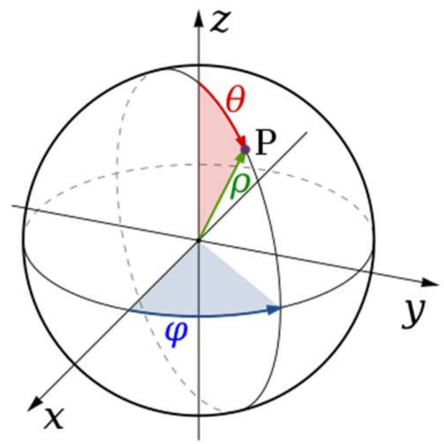
Moment cinétique: $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$

Ecriture en coordonnées sphériques

$$L_z = -i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$L^2 = \left\{ -\hbar^2 \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right\} + \left\{ \frac{1}{\sin^2(\theta)} \cdot L_z^2 \right\}$$

$$H = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot r} \right\} + \left\{ \frac{1}{2m_e \cdot r^2} \cdot L^2 \right\}$$



Commutateurs et conservation

$$\left[L_z, L^2\right] = \left[L_z, H\right] = \left[L^2, H\right] = 0$$

- L_z, L^2 et H ne dépendent pas explicitement du temps t
- L_z, L^2 et H commutent avec H

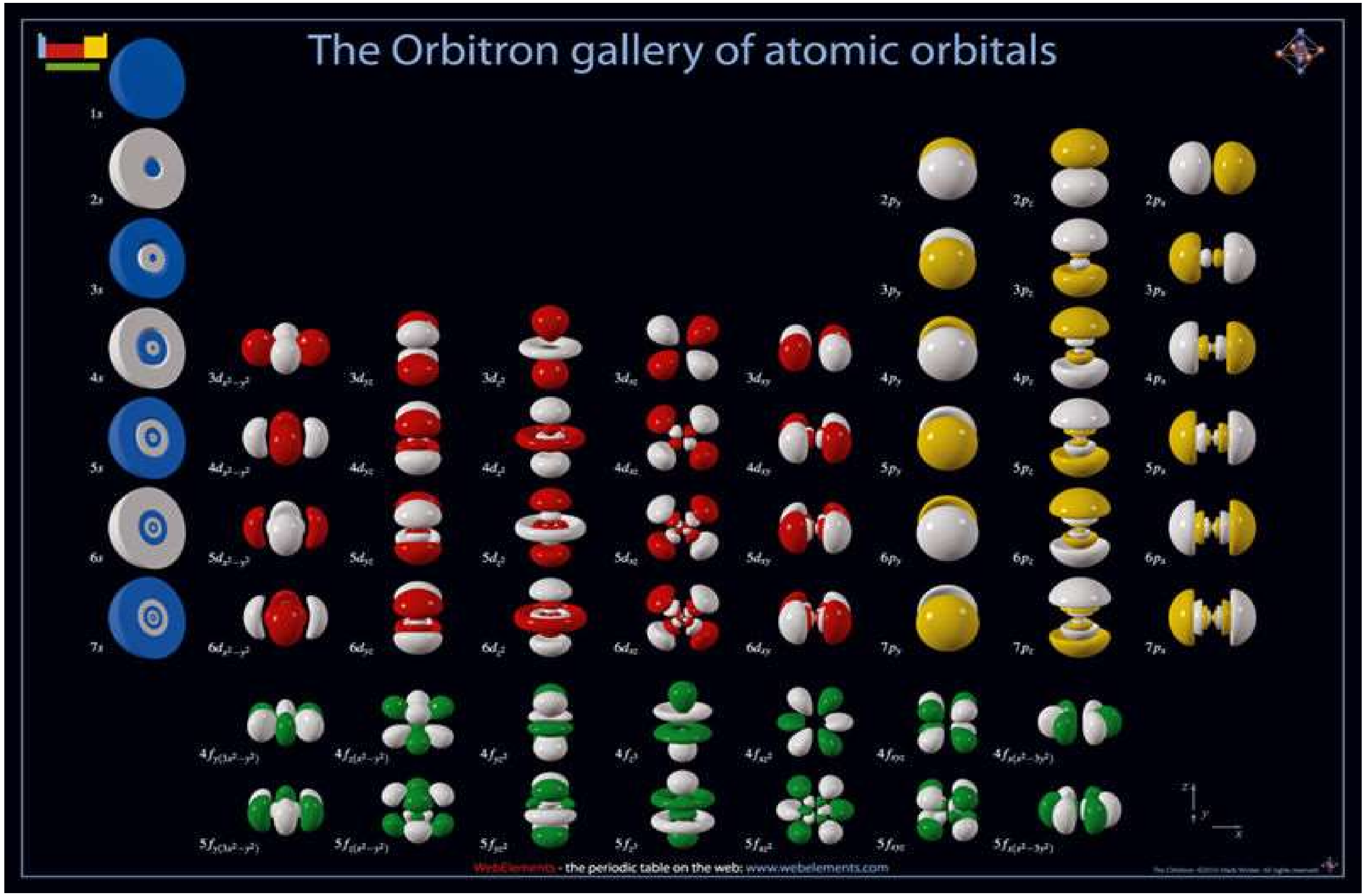
$\Rightarrow$ **$\langle L_z \rangle$, $\langle L^2 \rangle$ et $\langle H \rangle$ sont conservés**

- L_z, L^2 et H commutent entre eux

$\Rightarrow$ **L_z, L^2 et H ont la même base de modes propres**

PAB

Orbitales atomiques



www.webelements.com/shop/

Quantisation:

$$E_n = -Ry \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$L^2 = l\left(l+1\right) \cdot \hbar^2$$

$$L_Z = m \cdot \hbar$$

$n = 1, 2, 3, \ \ldots$

$l = 0, 1, 2, \ \ldots, (n-1)$

$m = -l, \ldots, +l$

Orbitales = mêmes modes propres mais différentes valeurs propres pour H, L^2 et L_z

Résumé des commutateurs

Définition:

$$\left[A,B\right]=AB-BA$$

1) Ehrenfest

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle A\rangle=\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle+\frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle$$

2) Loi de conservation

$$\left[A,H\right]=0 \qquad \Rightarrow \qquad \langle A\rangle \text{ est conservée}$$

3) Incertitudes généralisées

$$\Delta A\cdot\Delta B\geq\frac{1}{2}\cdot\left|\langle[A,B]\rangle\right|$$

4) Base commune

$$\left[A,B\right]=0 \quad \Rightarrow \quad \text{A et B ont des vecteurs propres communs}$$

Matrice densité

PAB

Rappel: moyenne pour un état superposé et pour un état mixte

Etat superposé:

$$|\psi\rangle = A|\psi_1\rangle + B|\psi_2\rangle \qquad \langle M\rangle_1 \equiv \langle\psi_1|M|\psi_1\rangle$$

$$\langle M\rangle_2 \equiv \langle\psi_2|M|\psi_2\rangle$$

$$\langle M\rangle = \langle\psi|M|\psi\rangle = |A|^2\langle M\rangle_1 + |B|^2\langle M\rangle_2 + A^*B\langle\psi_1|M|\psi_2\rangle + AB^*\langle\psi_2|M|\psi_1\rangle$$

Interférences

Etat mixte:

$$\varepsilon_{\%,1} \text{ en} |\psi_1\rangle \quad \text{et} \quad \varepsilon_{\%,2} \text{ en} |\psi_2\rangle$$

$$\langle M\rangle = \varepsilon_{\%,1}\cdot\langle\psi_1|M|\psi_1\rangle + \varepsilon_{\%,2}\cdot\langle\psi_2|M|\psi_2\rangle = \varepsilon_{\%,1}\cdot\langle M\rangle_1 + \varepsilon_{\%,2}\cdot\langle M\rangle_2$$

Rappel:
Produit extérieur de deux vecteurs et projecteur

Produit extérieur **ket-bra**

$$|\chi\rangle\cdot\langle\psi| \equiv \begin{pmatrix} \chi_0 \\ \chi_1 \\ \dots \\ \chi_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_0^* & \psi_1^* & \dots & \psi_n^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_0\psi_0^* & \chi_0\psi_1^* & \dots & \chi_0\psi_n^* \\ \chi_1\psi_0^* & \chi_1\psi_1^* & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \chi_n\psi_0^* & \dots & \dots & \chi_n\psi_n^* \end{pmatrix}$$

Projecteur:

Projecteur = produit extérieur du mode propre correspondant

Mode propre

Mode propre

$$\boxed{P_i \equiv |\varphi_i\rangle\cdot\langle\varphi_i|}$$

Matrice densité: Définition

Cas général de l'état superposé

$|\psi\rangle = \sum_i a_i \cdot |\varphi_i\rangle$ *avec* $|\varphi_i\rangle$ = modes propres de l'opérateur

$$\boxed{\rho \equiv |\psi\rangle \bullet \langle\psi| = \sum_{i,j} \left(a_i a_j^*\right) \cdot |\varphi_i\rangle \bullet \langle\varphi_j|}$$

Exemples:

$$|\psi\rangle_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \rho_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \rho_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Matrice densité: Définition

Matrice densité de l'état mixte

Soit $\varepsilon_{\%}$ les pourcentages des états purs ψ_m composant l'état mélangé $\quad 0 \le \varepsilon_{\%m} \le 1 \quad et \quad \sum_m \varepsilon_{\%m} = 1$

$$\boxed{\rho \equiv \sum_m \varepsilon_{\%m} \cdot \rho_m = \sum_m \varepsilon_{\%m} \cdot \left(\left| \psi_m \right\rangle \bullet \left\langle \psi_m \right| \right) \qquad avec \quad \left| \psi_m \right\rangle = \text{états purs}}$$

Exemple:

$$\boxed{\left| \psi \right\rangle_5 = 50\% \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \; et \; 50\% \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad \rho_5 = 0.5 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + 0.5 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}$$

Propriétés des matrices densité (1)

Les matrice densité sont diagonalisables avec de valeurs propres positives

$$\rho^\dagger = \rho$$

La trace d'une matrice densité est égale à 1

$$Tr(\rho) = 1$$

Pour un état superposé $\rho^2 = \rho \quad et \quad Tr(\rho^2) = 1$

Pour un état mixte $\rho^2 \neq \rho \quad et \quad Tr(\rho^2) < 1$

Totalement incohérent $\frac{1}{n} \leftarrow Tr\left(\rho^2\right) \rightarrow 1$ **Totalement cohérent**

PAB

Exemples (1)

Sur la base des exemples précédents:

Vérifications triviales: $\rho^\dagger = \rho$ et $Tr(\rho) = 1$

Etats superposés:

$$|\psi\rangle_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\rho_1^{\,2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \rho_1}$$

$$|\psi\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\rho_2^{\,2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \rho_2}$$

Etats mixtes:

$$|\psi\rangle_5 = 50\% \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad et \quad 50\% \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\rho_5^{\,2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \rho_5 \qquad Tr(\rho_5^{\,2}) = \frac{1}{2}}$$

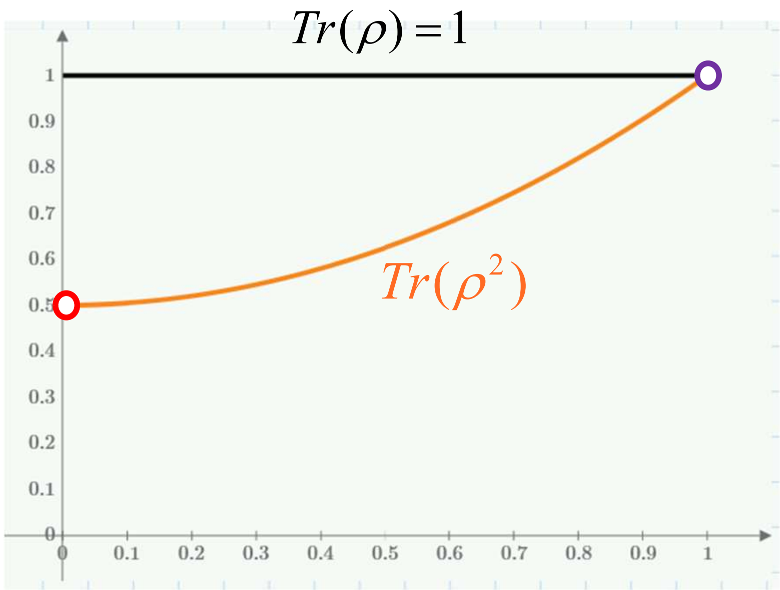
Exemples (2)

Sur la base des exemples précédents:

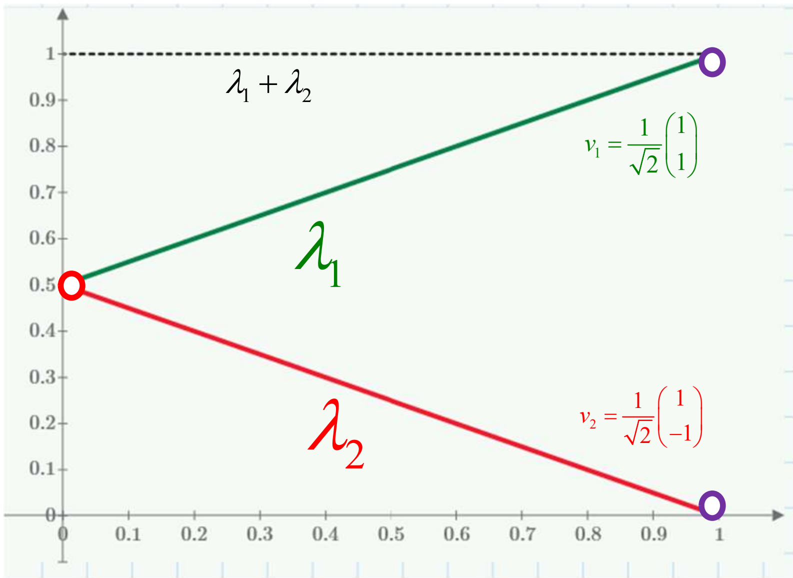
Supposons:

$$\rho = \varepsilon\% \cdot \rho_2 \; + \; (1-\varepsilon\%) \cdot \rho_5 \; = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \varepsilon\% \\ \varepsilon\% & 1 \end{pmatrix}$$

Superposé (cohérent) — Mixte (incohérent)



$\varepsilon\%$



$\varepsilon\%$

Valeurs et modes propres

Matrices densité

- Les valeurs propres sont réelles et comprises entre 0 et 1

Etats superposés:

- Une seule valeur propre est =1 les autres sont toutes =0.
- L'état superposé correspond au mode propre de valeur propre =1

Etats mixtes:

- Les valeurs propres sont inférieures à 1
- La somme des valeurs propres est =1

Moyenne de mesure (1): mode superposé

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_i a_i \cdot \left|\varphi_i\right\rangle \qquad avec \quad \left|\varphi_i\right\rangle = \text{modes propres de l'opérateur}$$

Matrice densité

$$\rho \equiv \left|\psi\right\rangle \bullet \left\langle\psi\right| \quad \Rightarrow \rho_{ik} = \left|\psi\right\rangle_i \cdot \left\langle\psi\right|_k$$

$$Tr\left(\rho \cdot M\right) = \sum_i \left(\rho \cdot M\right)_{i,i} = \sum_i \left(\sum_k \rho_{ik} \cdot M_{ki}\right)$$

Moyenne de mesure

$$= \sum_{ik} \left(\left|\psi\right\rangle_i \cdot \left\langle\psi\right|_k\right) \cdot M_{ki} = \sum_{ik} \left\langle\psi\right|_k \cdot M_{ki} \cdot \left|\psi\right\rangle_i$$

$$= \left\langle\psi\right| M \left|\psi\right\rangle = \left\langle M \right\rangle$$

$$\boxed{\left\langle M \right\rangle = \left\langle\psi\right| M \left|\psi\right\rangle = Tr\left(\rho \cdot M\right)}$$

Moyenne de mesure (2): mode mixte

Matrice densité

$$\rho \equiv \sum_m \varepsilon_{\%m} \cdot \rho_m = \sum_m \varepsilon_{\%m} \cdot \left(|\psi_m\rangle \bullet \langle \psi_m| \right)$$

$$\Rightarrow \rho_{ik} = \sum_m \varepsilon_{\%m} \cdot \left(|\psi_m\rangle_i \cdot \langle \psi_m|_k \right)$$

$$Tr(\rho \cdot M) = \sum_i (\rho \cdot M)_{i,i} = \sum_i \left(\sum_k \rho_{ik} \cdot M_{ki} \right)$$

Moyenne de mesure

$$= \sum_{ikm} \left(\varepsilon_{\%m} \cdot |\psi_m\rangle_i \cdot \langle \psi_m|_k \right) \cdot M_{ki} = \sum_{ikm} \varepsilon_{\%m} \cdot \langle \psi_m|_k \cdot M_{ki} \cdot |\psi_m\rangle_i$$

$$= \sum_m \varepsilon_{\%m} \cdot \langle \psi_m | M | \psi_m \rangle = \langle M \rangle$$

$$\boxed{\langle M \rangle = \sum_m \varepsilon_{\%m} \cdot \langle \psi_m | M | \psi_m \rangle = Tr(\rho \cdot M)}$$

Valide pour tous les cas !!

Evolution de la matrice densité

Schroedinger

$$\frac{d}{dt}|\psi\rangle = \frac{1}{i\hbar} H \cdot |\psi\rangle \qquad \frac{d}{dt}\langle\psi| = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\cdot H$$

$$\frac{d}{dt}\rho = \frac{d}{dt}\left(|\psi\rangle\cdot\langle\psi|\right) = \left(\frac{d}{dt}|\psi\rangle\right)\cdot\langle\psi| + |\psi\rangle\left(\frac{d}{dt}\langle\psi|\right)$$

$$= \left(\frac{1}{i\hbar}H|\psi\rangle\right)\cdot\langle\psi| + |\psi\rangle\left(\frac{-1}{i\hbar}\langle\psi|H\right) = \frac{1}{i\hbar}\left(H\cdot\rho - \rho\cdot H\right)$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\rho = -\frac{1}{i\hbar}\cdot\left[\rho, H\right]}$$

Théorème de Liouville-Von Neumann

Résumé sur la matrice densité

Définition:

Etat superposé: $$\rho \equiv \left|\psi\right\rangle \bullet \left\langle\psi\right|$$

Etat mixte: $$\rho \equiv \sum_m \varepsilon_{\%m} \cdot \left(\left|\psi_m\right\rangle \bullet \left\langle\psi_m\right|\right)$$

1) Moyenne

$$\left\langle M\right\rangle = Tr\left(\rho \cdot M\right)$$

2) Evolution (Liouville-Von Neumann)

$$\frac{d}{dt}\rho = -\frac{1}{i\hbar}\cdot\left[\rho, H\right]$$

Evolution des moyennes et de la matrice densité

Théorème d'Ehrenfest

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle A\rangle = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H]\rangle$$

Relie l'évolution de la moyenne quantique à la solution de physique classique

Théorème de Liouville-Von Neumann

$$\frac{d}{dt}\rho = -\frac{1}{i\hbar}\cdot[\rho,H]$$

Remplace l'équation de Schroedinger pour décrire l'évolution de l'état quantique

Comparaison: fonction d'onde / matrice densité

Mode superposé

Fonction d'onde

$$\left|\psi\right\rangle$$

Evolution: Schroedinger

$$\frac{d}{dt}\left|\psi\right\rangle = \frac{1}{i\hbar} H \cdot \left|\psi\right\rangle$$

Moyenne

$$\left\langle M \right\rangle = \left\langle \psi \middle| M \middle| \psi \right\rangle$$

Général

Matrice densité

$$\rho \equiv \sum_m \varepsilon_{\%m} \cdot \left(\left|\psi_m\right\rangle \bullet \left\langle \psi_m \right| \right)$$

Evolution: Liouville - Von Neumann

$$\frac{d}{dt}\rho = -\frac{1}{i\hbar} \cdot \left[\rho, H\right] + \text{"}environnement\text{"}$$

(Pertes, décohérence Lindbladian)

Moyenne

$$\left\langle M \right\rangle = Tr\left(\rho \cdot M\right)$$

Propagateurs

Propagateur

Equation de Schroedinger:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right\rangle = -i\frac{H}{\hbar}\cdot\left|\psi\right\rangle$$

Propagateur:

$$U(t) = e^{-i\frac{H}{\hbar}\cdot t}$$

Solution

$$\left|\psi(t)\right\rangle = U(t)\cdot\left|\psi_0\right\rangle = e^{-i\frac{H}{\hbar}\cdot t}\cdot\left|\psi_0\right\rangle$$

Exemple: fréquence de Larmor

$$\boxed{H = -\frac{\hbar}{2}\gamma B_z \cdot \sigma_Z} \quad \Rightarrow \quad \boxed{U(t) = e^{i\frac{\gamma B_z}{2}\cdot t\cdot \sigma_Z} = \cos\left(\frac{\gamma B_z}{2}\cdot t\right)\cdot 1 + i\sin\left(\frac{\gamma B_z}{2}\cdot t\right)\cdot \sigma_Z = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\gamma B_z}{2}\cdot t} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\gamma B_z}{2}\cdot t} \end{pmatrix}}$$

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad |\psi(t)\rangle = U(t)\cdot|\psi_0\rangle$$

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \frac{e^{i\frac{\gamma B_z}{2}\cdot t}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\cdot\Omega_L\cdot t} \end{pmatrix}}$$

Fréquence de Larmor

$$\boxed{\Omega_L \equiv \gamma B_z}$$

Sphère de Bloch

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

- normé
- phase globale sans intérêt

→ 2 variables uniquement

$$\Downarrow$$

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2)\cdot e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

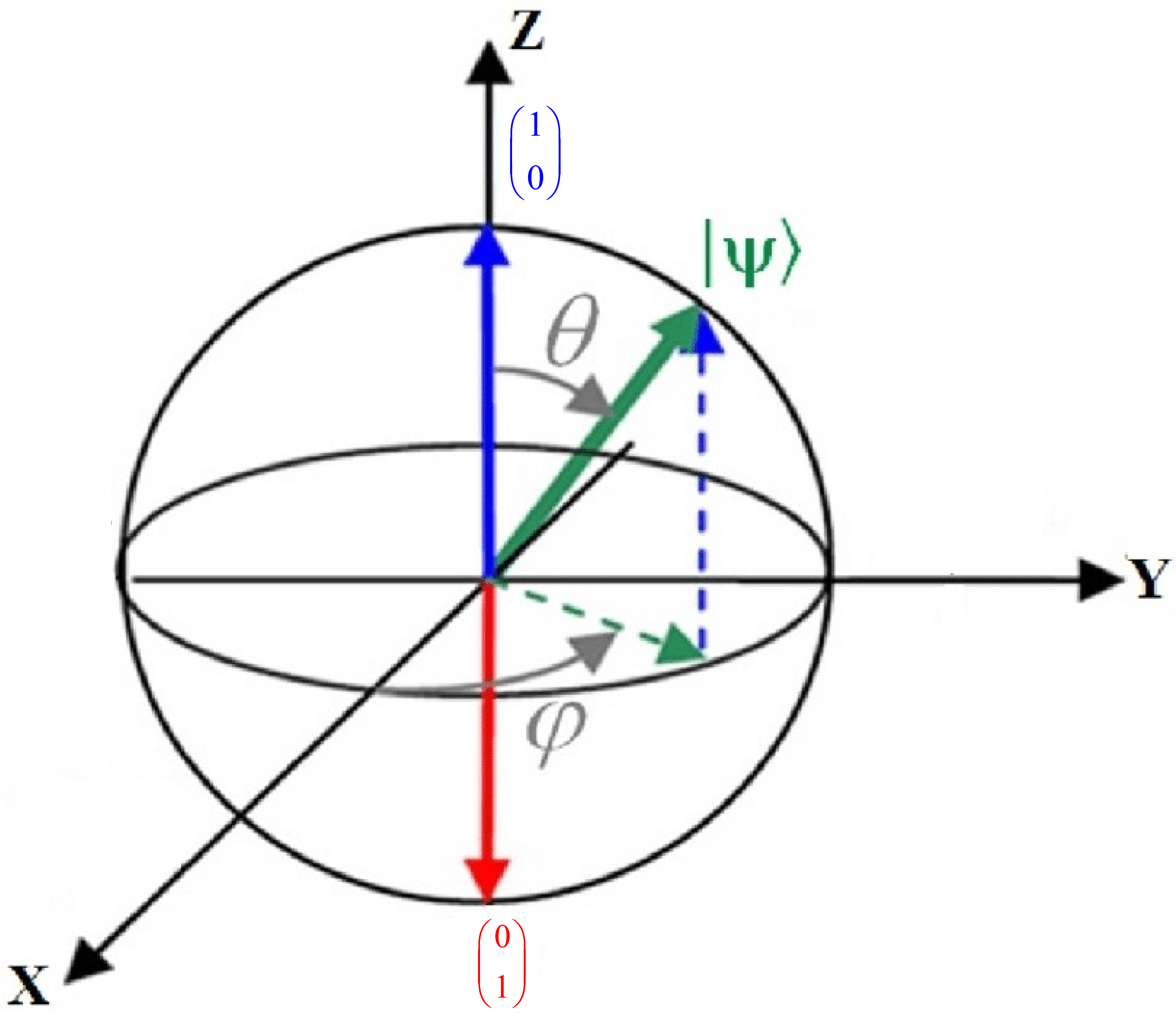
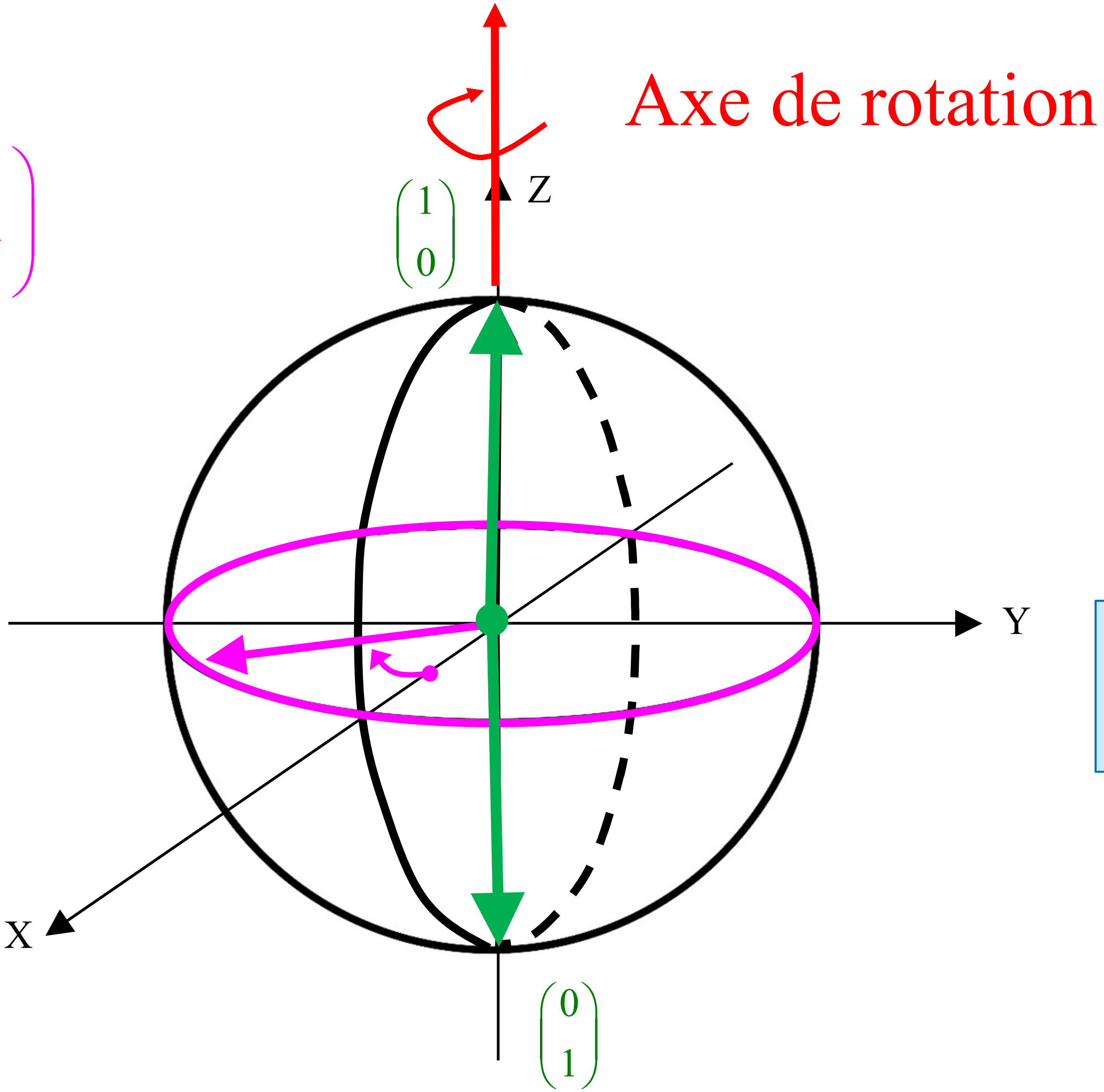


Illustration de la fréquence de Larmor sur la sphère de Bloch

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\Omega_L t} \end{pmatrix}$$



Fréquence de Larmor

$$\boxed{\Omega_L \equiv \gamma B_z}$$

Exercice 7.1 : Lois de conservation:

Si un opérateur A ne dépend pas explicitement du temps, sa valeur moyenne est conservée si A commute avec l'hamiltonien H

Exercice:

Supposons: $H = \dfrac{P_x^2 + P_y^2}{2m} + \dfrac{1}{2}\kappa \cdot x^2$

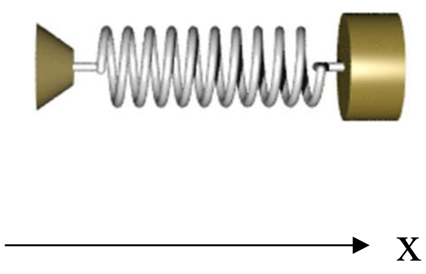
Lesquelles de ces valeurs moyennes sont conservées ?

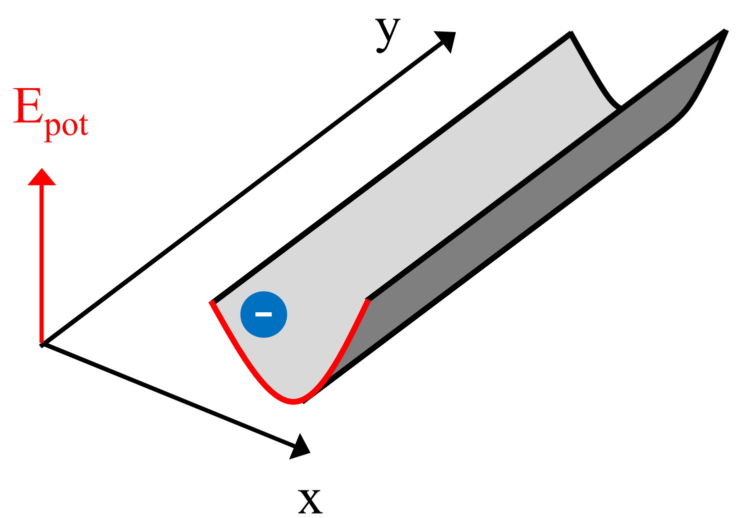
$\langle X \rangle$

$\langle Y \rangle$

$\langle P_x \rangle$

$\langle P_y \rangle$





Exercice 7.2: évolution des opérateurs

Soit un Hamiltonien de la forme:

$$H = \frac{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2}{2m} + V\left(\vec{x}\right)$$

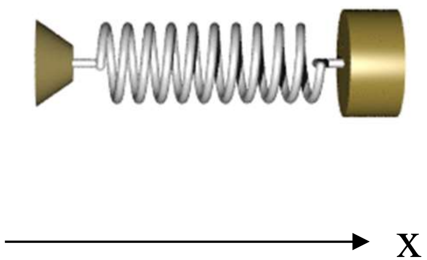
Calculez les évolutions suivantes:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \vec{X} \right\rangle$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \vec{P} \right\rangle$$

appliquez-le avec l'Hamiltonien 1D suivant:

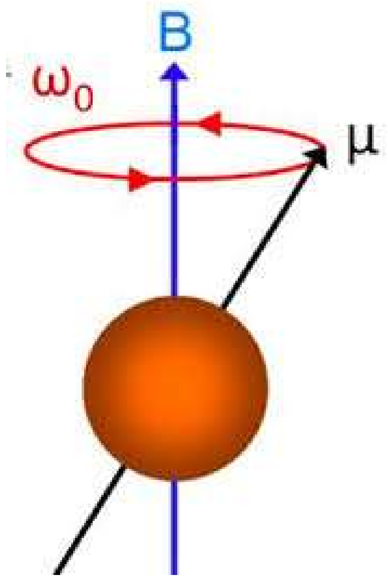
$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}\kappa \cdot x^2$$



Exercice 7.3

$$H = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -\frac{\hbar}{2}\gamma\left(B_x\sigma_X + B_y\sigma_Y + B_z\sigma_Z\right) \qquad \text{avec} \qquad \vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_Z \end{pmatrix}$$

$\vec{\mu} = \gamma\frac{\hbar}{2}\cdot\vec{\sigma} \equiv$ moment magnétique



1) Montrez que $\langle\sigma_z\rangle$ est conservé

2) Au temps t=0, $\langle\sigma_x(0)\rangle = 1 \quad et \quad \langle\sigma_y(0)\rangle = 0$

Calculez l'évolution de $\langle\sigma_x(t)\rangle \; et \; \langle\sigma_y(t)\rangle$

Base de la NMR
et de l'IRM