LES PROBABILITES
DE LA MECANIQUE QUANTIQUE

Stéphane ATTAL

LES AXIOMES DE LA MECANIQUE QUANTIQUE (Première version)

1. Etats

• Espace des états = un espace de Hilbert complexe $\mathcal{H}$.

• Etats possibles = vecteurs $\Psi \in \mathcal{H}$, de norme 1 : les *fonctions d'ondes.*

• La fonction d'onde contient toute l'information sur le système en question.

2. Observables

• Observables du système $\mathcal{H}$ = opérateurs auto-adjoints sur $\mathcal{H}$.

• Ensemble des valeurs numériques possibles de la mesure de l'observable H = le spectre (réel) $\sigma(H)$ de H.

• En dimension finie, H est une matrice hermitienne, de spectre

$$\sigma = \{\lambda_1, \ldots, \lambda_n\}$$

et de diagonalisation

$$H = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \, P_i \, .$$

La mesure de H prend la valeur λ_i avec probabilité

$$< \Psi \, , \, P_i \, \Psi > = ||P_i \, \Psi||^2$$

si l'état du système est Ψ.

• En dimension quelconque, si $\mathcal{H}$ est dans l'état Ψ, si l'observable H admet une mesure spectrale $A \mapsto \mathbb{1}_A(H)$, alors la probabilité de mesurer H à valeurs dans l'ensemble A vaut

$$< \Psi \, , \, \mathbb{1}_A(H) \, \Psi > .$$

Aussi égale à

$$||\mathbb{1}_A(H) \, \Psi||^2 = \mathrm{Tr}\big(|\Psi\rangle\langle\Psi| \, \mathbb{1}_A(H)\big) \, .$$

3. Evolution temporelle

- Observable énergie du système = *hamiltonien* du système.
- Soit H cet hamiltonien. On considère le groupe unitaire

$$U_t = e^{-itH} .$$

Si Ψ_0 est l'état du système à l'instant 0, il devient

$$\Psi_t = U_t \Psi_0$$

à l'instant t.

4. Réduction du paquet d'onde

- En dimension finie, si la mesure de H vaut λ_i, alors Ψ devient

$$\frac{P_i \, \Psi}{||P_i \, \Psi||} .$$

- En dimension quelconque, si la mesure de H appartient à A alors l'état Ψ devient

$$\frac{\mathbb{1}_A(H) \, \Psi}{||\mathbb{1}_A(H) \, \Psi||} .$$

• Système quantique $\mathcal{H}$ en interaction avec un autre $\mathcal{K}$:

$$\mathcal{H} \otimes \mathcal{K} .$$

• Situation typique : on n'a accés qu'à $\mathcal{H}$.

– Système $\mathcal{K}$ trop compliqué (environnement, bain thermique, canal bruité ...)

– Système $\mathcal{K}$ non accessible (information quantique, paire partagée, ...)

• Etat Ψ sur $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$, observable X sur $\mathcal{H}$, que donne le résultat de la mesure de X ?

$$\begin{aligned}
\mathrm{Prob}(X = \lambda_i) &= < \Psi\,,\, (P_i \otimes I)\, \Psi > \\
&= \mathrm{Tr}\big(|\Psi\rangle\langle\Psi|\, (P_i \otimes I)\big) \\
&= \mathrm{Tr}\big(\mathrm{Tr}_{\mathcal{K}}(|\Psi\rangle\langle\Psi|)\, P_i\big) \\
&= \mathrm{Tr}\big(\rho\, P_i\big)
\end{aligned}$$

avec $\rho = \mathrm{Tr}_{\mathcal{K}}(|\Psi\rangle\langle\Psi|)$.

• L'observateur de $\mathcal{H}$ ne voit pas Ψ mais $\rho = \mathrm{Tr}_{\mathcal{K}}(|\Psi\rangle\langle\Psi|)$.

LES AXIOMES DE LA MECANIQUE QUANTIQUE
(Deuxième version)

1. Etats

• Etats possibles = les opérateurs ρ sur $\mathcal{H}$ qui sont positifs, à trace et de trace 1, les *matrices densités* de $\mathcal{H}$.

$$\rho = \sum_n \lambda_n \, |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|$$

$(\lambda_n \geq 0, \; \sum_n \lambda_n = 1)$.

• La première version correspondait à

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi| \, .$$

2. Observables

• Si $\mathcal{H}$ est dans l'état ρ, si l'observable H admet une mesure spectrale $A \mapsto \mathbb{1}_A(H)$, alors la probabilité de mesurer H à valeurs dans l'ensemble A vaut

$$\mathrm{Tr}(\rho \, \mathbb{1}_A(H)) \, .$$

• En dimension finie, H est une matrice hermitienne, de spectre

$$\sigma = \{\lambda_1, \ldots, \lambda_n\}$$

et de diagonalisation

$$H = \sum_{i=1}^n \lambda_i \, P_i \, .$$

La mesure de H prend la valeur λ_i avec probabilité

$$\mathrm{Tr}(\rho \, P_i) \, .$$

3. Evolution temporelle

• Si ρ_0 est l'état du système à l'instant 0, il devient

$$\rho_t = U_t \, \rho_0 \, U_t^*$$

à l'instant t.

4. Réduction du paquet d'onde

• Si la mesure de H appartient à A alors l'état ρ devient

$$\frac{\mathbb{1}_A(H) \, \rho \, \mathbb{1}_A(H)}{\mathrm{Tr}(\rho \, \mathbb{1}_A(H))} \, .$$

• En dimension finie, si la mesure de H vaut λ_i, alors ρ devient

$$\frac{P_i \, \rho \, P_i}{\mathrm{Tr}(P_i \, \rho)} \, .$$

MODELE PROBABILISTE

1. Echec des probabilités classiques

• Il n'est pas possible de modéliser ces phénomènes aléatoires par des variables aléatoires classiques (variables cachées, inégalités de Bell, paradoxe EPR, expériences d'Aspect,...).

• On se donne une théorie plus large des probabilités, qui est dictée par les axiomes de la mécanique quantique.

2. Probabilités quantiques

• Une *espace probabilisé quantique* c'est $(\mathcal{H}, \rho)$

$\big[\neq (\Omega, \mathcal{F}, P)\big]$.

• Une *variable aléatoire quantique* c'est une observable, un opérateur auto-adjoint X sur $\mathcal{H}$

$\big[\neq$ une fonction mesurable $X\ :\ \Omega \to \mathbb{R}\big]$.

• La distribution de X dans l'état ρ c'est la mesure de probabilité μ sur $\mathbb{R}$ donnée par

$$\mu(A) = \mathrm{Tr}(\rho\, \mathbb{1}_A(X))\,.$$

Ou encore

$$\int f(x)\, d\mu(x) = \mathrm{Tr}(\rho f(X))$$

$$\widehat{\mu}(t) = \mathrm{Tr}(\rho\, e^{itX})\,.$$

$\big[\neq \mu = X \circ P\big]$.

3. Lien avec la théorie classique

• Lorsqu'on se donne *une seule* observable X sur $\mathcal{H}$, cela revient à la théorie classique :

– si X est une observable, on peut diagonaliser X ou le représenter comme un opérateur de multiplication sur un $(\Omega, \mathcal{F}, P)$,

– si X est une variable aléatoire, on prend $\mathcal{H} = L^2(\Omega, \mathcal{F}, P)$ et l'observable $\mathcal{M}_X$.

• De même pour toute famille $X_1, \ldots, X_n$ d'observables qui commutent. On peut diagonaliser simultanément. Ca revient à un n-uplet de variables aléatoires.

• Pour deux observables X et Y sur $\mathcal{H}$ qui ne commutent pas, pas d'interprétation classique possible du couple (X, Y).

Exemple 1

$\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, $\Psi = e_1$,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} .$$

Chacune admet une distribution de Bernoulli

$$\frac{1}{2}\delta_{-1} + \frac{1}{2}\delta_1$$

dans l'état Ψ. Par contre

$$\sigma_x + \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix}$$

a pour loi

$$\frac{1}{2}\delta_{-\sqrt{2}} + \frac{1}{2}\delta_{\sqrt{2}} .$$

Rien à voir avec la convolée des deux mesures de départ !

• Autre façon de le dire : la fonction

$$(t_1, t_2) \mapsto < \Psi \, , \, e^{it_1 X + it_2 Y} \Psi > = \cos\left(\sqrt{t_1^2 + t_2^2}\right)$$

n'est pas la transformée de Fourier d'une mesure sur $\mathbb{R}^2$.

Exemple 2

$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ et

$$\Psi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \, e^{-x^2/4} \, .$$

On considère les observables

$$Qf(x) = xf(x) \qquad Pf(x) = 2if'(x) \, .$$

Alors la distribution de Q dans l'état Ψ est gaussienne $\mathcal{N}(0,1)$:

$$< \Psi \, , \, Q^n \Psi > = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int x^n \, e^{-x^2/2} \, dx \, .$$

D'ailleurs celle de P aussi (soit par calcul direct, soit par transformation de Fourier).

• Soient

$$a^+ = \frac{1}{2}(Q - iP) \qquad a^- = \frac{1}{2}(Q + iP) \qquad N = a^+ a^- \, .$$

Alors la distribution de N dans l'état Ψ est δ_0 car

$$N\Psi = 0 \, .$$

Celle de $N + I$ est δ_1.

• Mais la distribution de $Q + N + I$ dans l'état Ψ est ...

une loi de Poisson de paramètre 1 (!!!)

$$P(n) = \frac{1}{n!} \, e^{-1} \, .$$

• En général :

$$T\Phi = \bigotimes_{n \in \mathbb{N}} \mathcal{H}$$

où $\mathcal{H}$ est un espace de Hilbert séparable.

• Ici, on se contente de

$$T\Phi = \bigotimes_{n=1}^{N} \mathbb{C}^2 \,.$$

Base orthonormée X_σ où $\sigma = \{i_1, \ldots, i_k\}$ et

$$X_\sigma = X_{i_1} \otimes \ldots \otimes X_{i_k} \,.$$

• Matrices de base :

$$a_0^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad a_1^0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad a_0^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad a_1^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} .$$

Elles agissent ensuite sur chaque composante du produit tensoriel : $a_j^i(n)$.

• Soit $(\Omega, \mathcal{F}, \mu_p)$ l'espace canonique d'une suite de N variables de Bernoulli ν_n i.i.d. de loi $p\delta_1 + q\delta_0$. Les variables aléatoires

$$X_n = \frac{\nu_n - p}{\sqrt{pq}}$$

sont centrées réduites. Les variables aléatoires

$$X_\sigma = X_{i_1} \ldots X_{i_k}$$

forment une b.o.n. de $L^2(\Omega, \mathcal{F}, \mu_p)$. Qui s'identifie donc naturellement à l'espace $T\Phi$.

Notez que pour chaque p on a un espace $(\Omega, \mathcal{F}, \mu_p)$ différent, et qu'ils n'ont rien à voir entre eux.

Théorème – *L'opérateur de multiplication par X_n sur son espace L^2 canonique correspond à l'opérateur*

$$a_1^0(n) + a_0^1(n) + c_p\, a_1^1(n)$$

sur $T\Phi$, avec

$$c_p = \frac{q-p}{\sqrt{pq}}\,.$$

L'application $p \mapsto c_p$ est une bijection de $(0,1)$ dans $\mathbb{R}$.

• De la même façon sur $T\Phi$ plus général on peut représenter toutes les marches aléatoires sur $\mathbb{R}^d$, toutes les chaînes de Markov dans $\mathbb{R}^d$, au moyen de combinaisons linéaires simples des opérateurs $a_j^i(n)$.

• On peut faire de même avec

$$\Phi = \bigotimes_{t \in \mathbb{R}^+} \mathcal{H}$$

où $\mathcal{H}$ est un espace de Hilbert séparable.

• Par exemple

$$\Phi = \bigotimes_{t \in \mathbb{R}^+} \mathbb{C}^2 .$$

Base orthonormée continue dX_σ où $\sigma = \{t_1, \ldots, t_n\}$ et

$$dX_\sigma = dX_{t_1} \otimes \ldots \otimes dX_{t_n} .$$

• Matrices de base :

$$da_0^0(t) = \begin{pmatrix} dt & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad da_1^0(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$da_0^1(t) = \begin{pmatrix} 0 & dt \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad da_1^1(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} .$$

• Soit $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ l'espace canonique du mouvement brownien $(W_t)_{t \geq 0}$. La *propriété de représentation chaotique* : tout $F \in L^2(\Omega, \mathcal{F}, P)$ s'écrit de manière unique

$$F = \mathbb{E}[F] + \sum_{n=1}^{\infty} \int_{0 \leq t_1 \leq \ldots \leq t_n} f_n(t_1, \ldots, t_n) \, dW_{t_1} \, \ldots \, dW_{t_n}$$

avec la formule d'isométrie d'Itô

$$||F||_2^2 = |\mathbb{E}[F]|^2 + \sum_{n=1}^{\infty} \int_{0 \leq t_1 \leq \ldots \leq t_n} |f_n(t_1, \ldots, t_n)|^2 \, dt_1 \, \ldots \, dt_n .$$

Ceci fait que $L^2(\Omega, \mathcal{F}, P)$ est naturellement isomorphe à Φ.

Théorème – *L'opérateur de multiplication par W_t sur son espace L^2 canonique correspond sur Φ à l'opérateur*

$$a_1^0(t) + a_0^1(t).$$

• Soit $(\Omega,' \mathcal{F}', P')$ l'espace canonique du processus de Poisson compensé $(X_t)_{t\geq 0}$. La *propriété de représentation chaotique* rend de la même façon l'espace $L^2(\Omega,' \mathcal{F}', P')$ naturellement isomorphe à Φ.

Théorème – *L'opérateur de multiplication par X_t sur son espace L^2 canonique correspond à l'opérateur*

$$a_1^0(t) + a_0^1(t) + a_1^1(t).$$

• De la même façon sur Φ plus général on peut représenter la plupart des processus stochastiques usuels sur $I\!R^d$ (processus de Levy), au moyen de combinaisons linéaires simples des opérateurs $a_j^i(t)$.

RETOUR AUX SYSTEMES OUVERTS

1. Canaux bruités

Quelle est la transformation la plus générale possible d'un état ?

$$\rho \mapsto \rho \otimes \omega \mapsto U(\rho \otimes \omega)U^* \mapsto \mathrm{Tr}_{\mathcal{K}}\left(U(\rho \otimes \omega)U^*\right) .$$

C'est une application complètement positive sur $\mathcal{L}_1(\mathcal{H})$ (ou sur $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ par dualité) :

$$\mathcal{L}(\rho) = \sum_i L_i \, \rho \, L_i^*$$

avec

$$\sum_i L_i^* L_i = I$$

(Théorème de Stinespring, Théorème de Krauss).

2. Cas dépendant du temps

Evolution générale d'un état au cours du temps : $(P_t)_{t \geq 0}$ semigroupe d'application complétement positives

$$P_t = e^{tL}$$

avec

$$L(\rho) = -i[H, \rho] - \frac{1}{2} \sum_n (L_n L_n^* \rho + \rho L_n L_n^* - 2 L_n^* \rho L_n)$$

(Théorème de Lindblad).

3. Problématique générale

• Etant donnée une observation partielle de l'évolution d'un système quantique (un générateur de Lindblad L), comment recréer un modèle de l'environnement qui intéragit avec ce système ?

• Comportements asymptotiques (convergence, vitesse, thermalisation, ...) du petit système ?

• Que se passe-t'il dans l'environnement ? (photons émis, reçus, ...)

• Réponse :

$$\mathcal{H} \otimes \Phi$$

On résoud une équation de Schrödinger perturbée par des bruits quantiques

$$dU_t = HU_t\,dt + \sum_{i,j} H^i_j U_t\,da^i_j(t)$$

telle que la solution U_t est unitaire et

$$<\Omega\,,\,U_t^*(X \otimes I)U_t\,\Omega> = P_t(X)\,.$$

APPLICATIONS

- Conduction de la chaleur en mécanique quantique.
- Optique quantique (lasers).
- Observation continue des systèmes quantiques (trajectoires quantiques).
- Théorie quantique de l'information.

Mais aussi

- Grandes matrices aléatoires (probabilités libres).
- Algèbres d'opérateurs (probabilités libres).
- Théorie des processus stochastiques (Unification, P.R.C.)