Opérateur / Matrice Densité

Le concept de base

Concepts importants :

- Moyenne d'un opérateur $\hat{O}$: On peut écrire $\bar{O} = \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle = \mathrm{tr}\left(\hat{O}|\psi\rangle\langle\psi|\right)$

$$\bar{O} = \sum_{i,j} \psi_j^\star O_{ji} \psi_i = \sum_{j,i} O_{ji} \times \psi_i \psi_j^\star$$

On définit la **matrice densité** $\hat{\rho} := |\psi\rangle\langle\psi|$ et on écrit $\bar{O} = \mathrm{tr}\left(\hat{O}\hat{\rho}\right)$

Exemple pour un espace de Hilbert de dimension 2 (par exemple spin up / spin down):

$$|\Psi\rangle = c_1|\uparrow\rangle + c_2|\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi| \equiv \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1 c_2^\star \\ c_2 c_1^\star & |c_2|^2 \end{pmatrix}$$

- Sur la base des |n>, les éléments de la diagonale de la matrice densité sont les poids "classiques" $|c_n|^2$, tandis que les termes non-diagonaux représentent les interférences.
- Normalisation : $\mathrm{tr}\,(\hat{\rho}) = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1$
- L'intérêt de la matrice densité est **de permettre d'effectuer quelques opérations qui ne peuvent être définies sur un état quantique décrit par des fonctions d'ondes**.

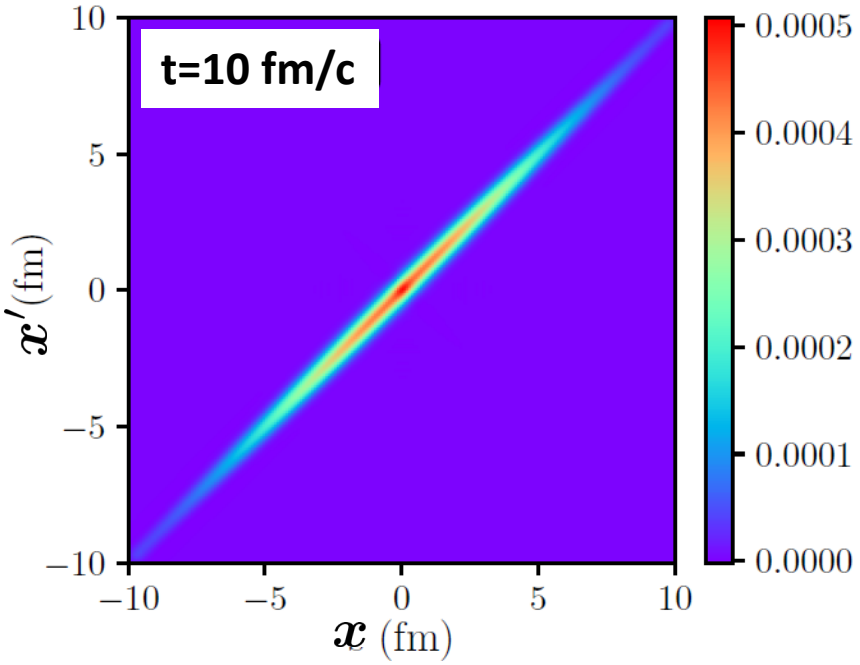
Le concept de base

Concepts importants :

- Cas d'une fonction d'onde (espace de Hilbert de dimension infinie); la matrice densité s'exprime comme :

$$\rho(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') := \langle \boldsymbol{x}|\hat{\rho}|\boldsymbol{x}'\rangle = \langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle\langle\psi|\boldsymbol{x}'\rangle = \psi(\boldsymbol{x})\psi^{\star}(\boldsymbol{x}')$$

  - La densité de probabilité s'exprime simplement comme $\rho(\boldsymbol{x}) = \rho(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})$



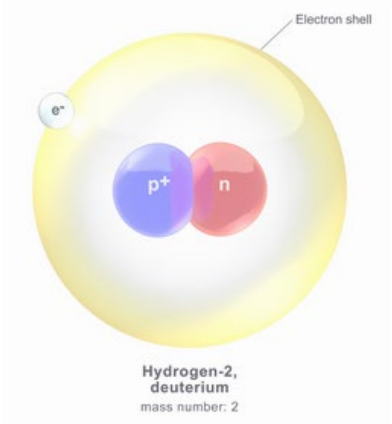
Exemple de l'évolution d'une paire de quark lourd en contact avec un plasma « quark gluon » (voir cours sur les systèmes quantiques ouverts)

  - Normalisation : $\int d\boldsymbol{x}\rho(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = 1$

La réduction

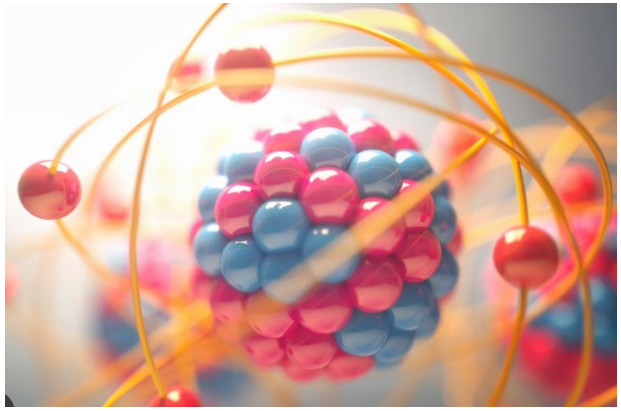
Concepts importants : **La réduction**

- Soit un espace de Hilbert produit $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$
- Les éléments de $\mathcal{E}$ peuvent s'écrire comme $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$



Exemple : description du noyau du deutérium (un proton et un neutron)

- Pour un système plus complexe (Z protons au sein du noyau) :

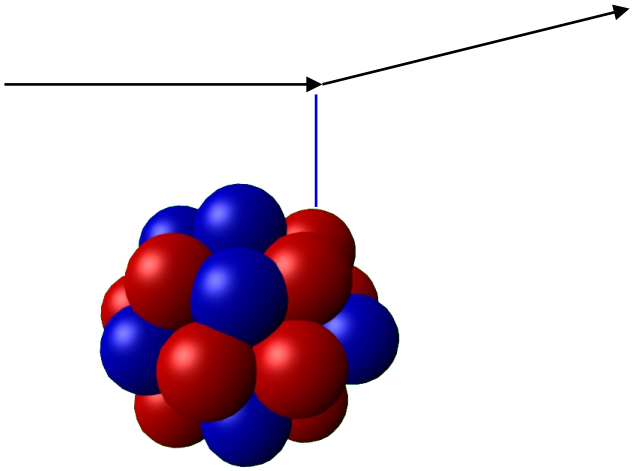


$$\psi(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \ldots, \boldsymbol{x}_Z)$$

La réduction

Concepts importants : **La réduction**

- Interaction electron – noyau : en bonne première approximation l'electron n'interagit pas avec 2 protons simultanément => comment construire une description plus "compacte" des Z protons … tout en préservant le maximum d'information ?



- On ne peut pas "réduire" la fonction d'onde :

$$\psi_{\mathrm{red}}(\boldsymbol{x}_1) := \int d\boldsymbol{x}_2 d\boldsymbol{x}_3, \ldots d\boldsymbol{x}_Z \psi(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \ldots, \boldsymbol{x}_Z)$$ n'a aucun sens !!!

La norme n'est en effet pas préservée

- Par contre, on peut "réduire" une matrice densité

$$\rho_Z(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}'_1, \ldots, \boldsymbol{x}_Z, \boldsymbol{x}'_Z) := \psi(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \ldots, \boldsymbol{x}_Z)\psi^\star(\boldsymbol{x}'_1, \boldsymbol{x}'_2, \boldsymbol{x}'_3, \ldots, \boldsymbol{x}'_Z)$$

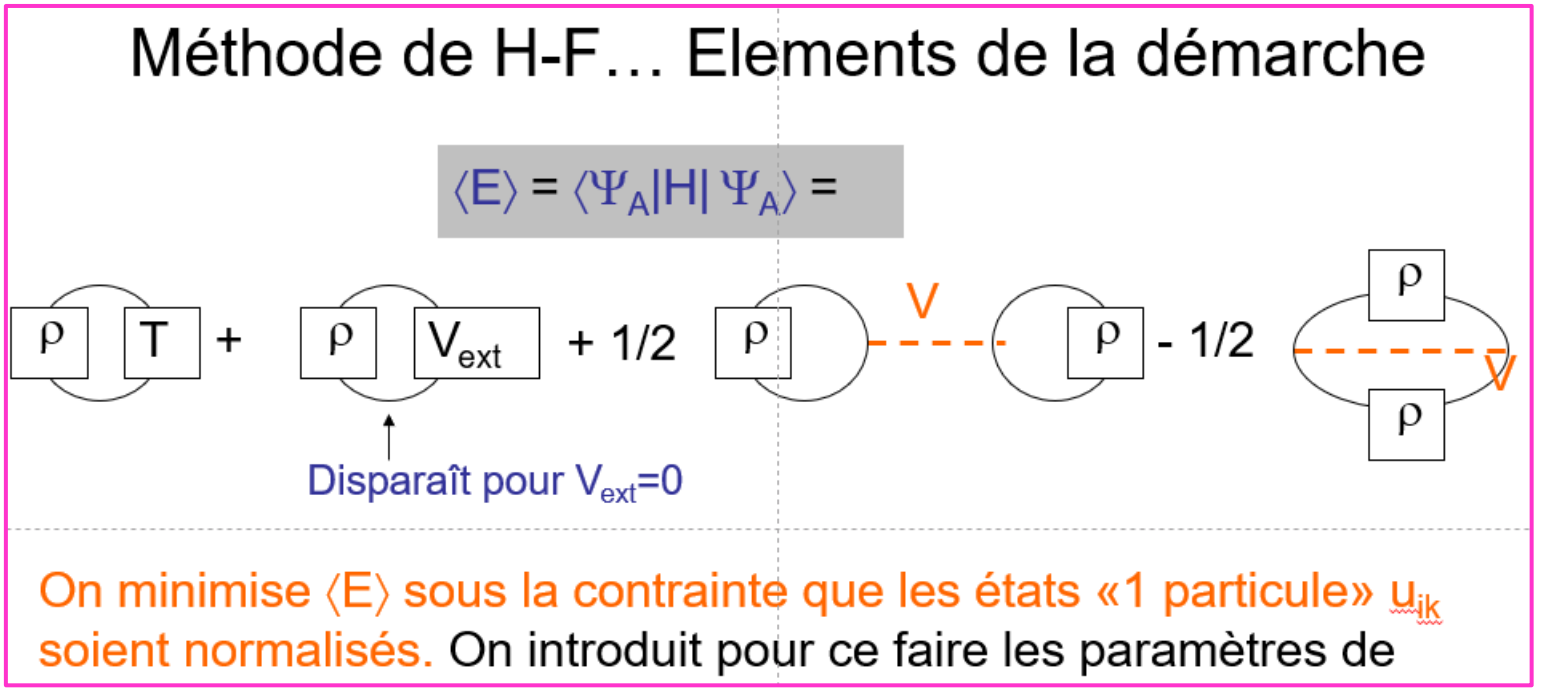
$$\rho_{\mathrm{red}}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}'_1) := \int d\boldsymbol{x}_2 d\boldsymbol{x}_3, \ldots d\boldsymbol{x}_Z \rho_Z(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}'_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_Z, \boldsymbol{x}_Z)$$ est le concept adéquat

- On note aussi : $\rho_{\mathrm{red}}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}'_1) := \mathrm{tr}_{2,\ldots Z}\rho_Z(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}'_1, \ldots)$

La réduction

Concepts importants : **La réduction**

- Exercice : en partant d'un état factorisé $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$, montrer que l'on retrouve bien la densité $\rho_1(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}'_1)$ en appliquant la reduction sur la densité $\rho_2(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}'_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}'_2)$
- Exemple d'application en physique nucléaire : Hartree-Fock



La réduction

Concepts importants : La réduction : on intègre sur les variables du système 2 et on obtient une matrice densité (dite “réduite”) portant sur le système 1

- Définition : $\hat{\rho}_{i_1,i_2;i'_1,i'_2} \Rightarrow \hat{\rho}^{\mathrm{red}}_{i_1;i'_1} := \sum_{i_2} \hat{\rho}_{i_1,i_2;i'_1,i_2}$

- Exemple de “reduction” : état de Bell $|\psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle_1|1\rangle_2 + |1\rangle_1|0\rangle_2\right)$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left(|0\rangle_1|1\rangle_2 + |1\rangle_1|0\rangle_2\right) \left({}_1\langle 0|{}_2\langle 1| + {}_1\langle 1|{}_2\langle 0|\right)$$

4 termes

$$\hat{\rho}^{\mathrm{red}} = \frac{1}{2} \Big(\underbrace{\langle 1|1\rangle_2}_{1} |0\rangle_{11}\langle 0| + \underbrace{\langle 0|0\rangle_2}_{1} |1\rangle_{11}\langle 1| + \underbrace{\langle 0|1\rangle_2}_{0} |0\rangle_{11}\langle 1| + \underbrace{\langle 1|0\rangle_2}_{0} |1\rangle_{11}\langle 0| \Big)$$

$$= \frac{1}{2} \left(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|\right)$$

50% dans l’état |0> et 50% dans l’état |1>

!!! Pas fondamentalement un état mixte

Coherence has been « delocalized » in the larger system (in a basis « invariant » way)… and this will translate into some effective decoherence of the quantum system.

Une bonne experience de physique



L'observatoire Borexino au Laboratoire national du Gran Sasso en septembre 2015.

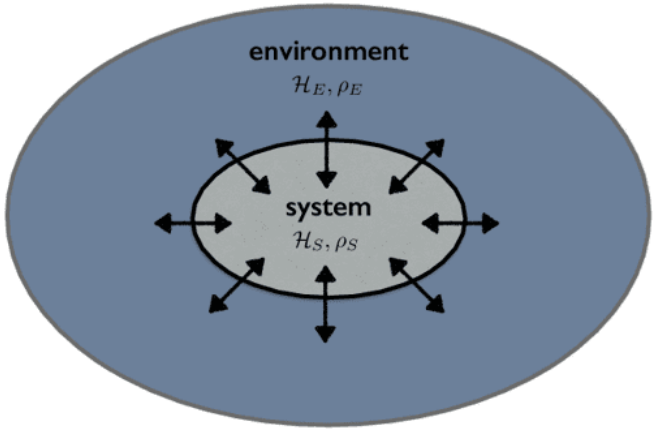
Recherche de particules rares et furtives .

Besoin de s'isoler au maximum des rayonnements cosmiques et en général de l'environnement.

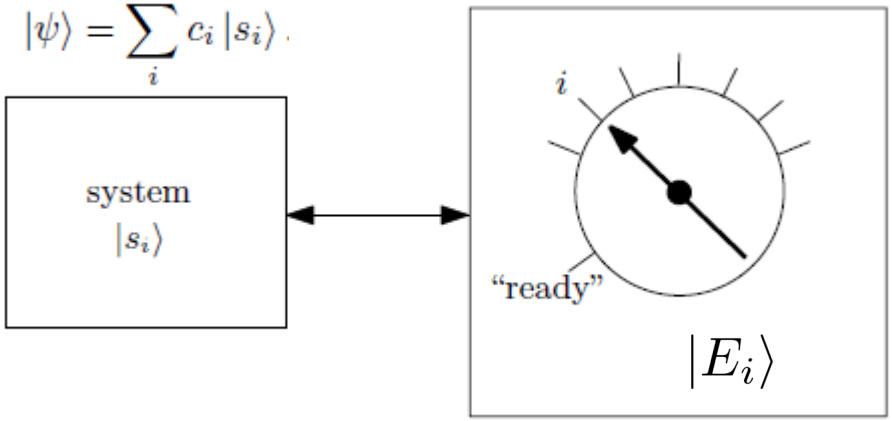
Paradigme du système isolé… aussi adopté par les fondations de la mécanique quantique et les "early experiments" (microscopique) … mais difficultés conceptuelles dès que l'on va vers le macroscopique….
… Et de nos jours, micro et macro ne sont plus deux mondes bien séparés (importance du méso)

Intro: Decoherence & system-environment interaction

From B. Vacchini



- Revisited all longstanding problems of quantum mechanics with a new paradigm : **quantum systems are naturally coupled to some external environment whose role cannot be ignored**.
- Starting from uncorrelated system – detector / environment state, the interaction between the system and the environment will build some global entangled state (environment is more than a mere perturbation)



Interaction with environment

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle\right)|E_0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1\rangle|E_1\rangle + |\psi_2\rangle|E_2\rangle\right)$$

t=0

Entangled !

Coherence has been « delocalized » in the larger system (in a basis « invariant » way)… and this will translate into some effective decoherence of the quantum system.

Intro: Decoherence & system-env. interaction

Concepts importants :

- Matrice densité réduite: Supposons comme annoncé, que le système s'intrique avec l'environnement :

Interaction with environment

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle\right)|E_0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1\rangle|E_1\rangle + |\psi_2\rangle|E_2\rangle\right)$$

Entangled !

- L'environnement étant complexe, on ne peut en general le mesurer, on peut juste effectuer des expériences sur le système… soit O_s une telle observable. On peut alors bien entendu écrire

$$\bar{O}_s = \tfrac{1}{2}\sum_{i,j}\langle\psi_i|O_s|\psi_j\rangle\langle E_i|E_j\rangle$$

Dans l'espace de Hilbert du système Dans l'espace de Hilbert de l'environnement

- … mais on perd alors toute la matrice densité

- On préfère définir la matrice densité réduite $\hat{\rho}_S = \tfrac{1}{2}\sum_{i,j}\langle E_i|E_j\rangle|\psi_j\rangle\langle\psi_i| \in \mathcal{H}_S^2$ telle que $\bar{O}_s = \mathrm{tr}(\hat{\rho}_S O_s)$; il s'agit de la partie "observable" du système quantique complet.
- On note également $\hat{\rho}_S = \mathrm{tr}_{\mathcal{E}}\left(\hat{\rho}\right)$

Les systèmes mixtes (moyennes statistiques)

Concepts importants : Les moyennes statistiques

- Comment combiner la physique statistique et la mécanique quantique ?
- Si on a H(t) = H0 + $H_{stochastique}(t)$: plus une évolution déterministe !!! Comment décrire l'évolution "moyenne" (au sens de la physique statistique) d'un état quantique ?

  Pas avec une fonction d'onde moyenne !!!
- Si une matrice densité peut s'écrire sous la forme $\hat{\rho} := |\psi\rangle\langle\psi|$, on parle d'état "pur"

  (ne pas confondre avec un état intriqué)
- Etat pur = état quantique usuel qui peut être décrit par une fonction d'onde (ou un "ket") et "reproduit" sans incertitude "statistique"
- Quid des systèmes qui ne sont pas complètement determinés (au sens usuel des fluctuations statistiques) ? Si chaque état $|\psi_i\rangle$ est préparé avec une probabilité (classique) p_i , on peut définir définir l'état dit "mixte" :

$$\hat{\rho} := \sum_i p_i |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|$$

Les systèmes mixtes (moyennes statistiques)

Concepts importants : Les moyennes statistiques

- Matrice densité: Exemple d'une experience où spin up préparé dans 50% des cas et spin down dans 50% des cas :

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} 0,5 & 0 \\ 0 & 0,5 \end{pmatrix}$$

- … alors qu'experience où superposition quantique :

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle \right) \qquad \Rightarrow \hat{\rho} = \cdots ?$$

- Dans ce cas

$$\bar{O} = \mathrm{tr}\left(\hat{O}\hat{\rho}\right) = \sum_i p_i \bar{O}_i$$

Moyenne double : quantique ET statistique

!!! On ne peut pas toujours "remonter" aux valeurs des p_i et aux $|\psi_i\rangle$ sur la base de la matrice densité "mixte"; il n'y a pas de "base privilégiée".

Evolution temporelle

On part de l'équation de Schoedinger : $i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$

Et de la definition de la matrice densité : $\hat{\rho} := |\psi\rangle\langle\psi|$

$$\begin{aligned}\hbar \frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) &= \left(\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right)\langle\psi(t)| + |\psi(t)\rangle\left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right) \\ &= \left(-i\hat{H}|\psi(t)\rangle\right)\langle\psi(t)| + i|\psi(t)\rangle\left(\langle\psi(t)|\hat{H}\right) \\ &= -i\left[\hat{H}, |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|\right] = -i\left[\hat{H}, \hat{\rho}(t)\right]\end{aligned}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H}, \hat{\rho}(t)\right]$$

Equation de Von Neumann

Transformée de Wigner

Définition :

$$W(x,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}y\; e^{-\frac{ipy}{\hbar}} \left\langle x + \frac{y}{2} \left| \hat{\rho} \right| x - \frac{y}{2} \right\rangle$$

Il s'agit du meilleur objet qui puisse permettre de se "raccorder" au monde classique.

On peut l'interpréter comme une "densité quantique" dans l'espace des phases (x,p).

On a en effet les distributions marginales :

$$\int dp W(x,p) = \int \mathrm{d}y\; \delta(y) \left\langle x + \frac{y}{2} \left| \hat{\rho} \right| x - \frac{y}{2} \right\rangle = \langle x|\hat{\rho}|x\rangle = \rho(x)$$

$$\int dx W(x,p) = \cdots = \tilde{\rho}(p)$$

Attention : la TW n'est pas définie positive :

Exercice : calculer la TW pour un paquet d'onde Gaussie

