Matrice densité

En Mécanique Quantique, on sait qu'un système isolé, ou bien un système soumis à des contraintes extérieures fixes, qui ne sont pas affectées par l'évolution du système, est décrit par un vecteur d'état. Mais ces situations sont loin de recouvrir toutes celles que l'on rencontre en physique. Comment décrire un système qui a interagi avec un autre, puis s'en est séparé, ou bien un système présentant dans sa préparation ou son évolution des éléments fluctuants, nécessitant l'utilisation de moyennes statistiques, ou bien encore un système qui n'est qu'une petite partie d'un ensemble plus important?

L'opérateur, ou matrice, densité est l'outil qui permet de décrire toutes ces situations. Nous l'introduirons tout d'abord sur des systèmes dits "purs" pour lesquels la description en termes de fonction d'onde est aussi possible, puis nous l'étendrons aux autres situations.

1 Cas pur

1.1 Vecteur d'état

Par définition, dans un cas pur, la description du système se fait grâce à un vecteur d'état que nous développons ici sur la base des $\{|u_n\rangle\}$, vecteurs propres d'une observable donnée \hat{M} :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n} c_n(t)|u_n\rangle$$
 avec $\sum_{n} |c_n(t)|^2 = 1$.

Lorsqu'on mesure la quantité M, on obtient comme résultat la valeur propre a_n de l'opérateur \hat{M} avec la probabilité $|c_n|^2$. Les coefficients c_n sont des amplitudes de probabilité. En vertu du principe de superposition, ces amplitudes de probabilité peuvent interférer, une caractéristique qui n'a pas d'équivalent en physique classique.

L'évolution temporelle du vecteur d'état est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle,$$

où $\hat{H}(t)$ est l'hamiltonien du système. La valeur moyenne $\langle \hat{A} \rangle$ d'un opérateur quelconque \hat{A} est :

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \sum_{n,p} c_n^* c_p \langle u_n | \hat{A} | u_p \rangle = \sum_{n,p} c_n^* c_p A_{np}$$

1.2 Opérateur densité

L'opérateur densité est défini par :

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = \sum_{n,p} c_n^* c_p |p\rangle\langle n|.$$

C'est l'opérateur hermitien de projection sur l'état décrivant le système. Remarquons immédiatement que l'arbitraire de phase de la fonction d'onde disparaît pour l'opérateur densité.

Les éléments de matrice de cet opérateur valent :

$$\rho_{pn} = \langle u_p | \hat{\rho} | u_n \rangle = c_n^* c_p$$

La valeur moyenne d'un opérateur \hat{A} s'exprime simplement grâce à l'opérateur densité :

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{n,p} c_n^* c_p A_{np} = \sum_{np} \rho_{pn} \langle u_n | \hat{A} | u_p \rangle = \sum_p \langle u_p | \hat{\rho}(t) \hat{A} | u_p \rangle = Tr(\hat{\rho}(t) \hat{A}).$$

Remarquons que la valeur moyenne dépend linéairement de $\hat{\rho}$, alors qu'elle dépendait quadratiquement du vecteur d'état.

Il est élémentaire d'établir les propriétés suivantes de la matrice densité pour un cas pur :

$$Tr\hat{\rho}(t)=1$$
 conservation de la probabilité totale,
 $\langle \hat{A} \rangle(t)=Tr(\hat{A}\hat{\rho}(t))=Tr(\hat{\rho}(t)\hat{A})$ valeur moyenne,
 $i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t)=[\hat{H}(t),\hat{\rho}(t)]$ évolution temporelle,
 $\hat{\rho}^{\dagger}(t)=\hat{\rho}(t)$ opérateur hermitien,
 $\hat{\rho}^{2}(t)=\hat{\rho}(t)$ opérateur de projection (1)

Considérons le cas particulier où \hat{H} est indépendant du temps. Il est utile de décomposer le vecteur d'état sur la base des états propres $|u_n\rangle$ de cet hamiltonien. Les coefficients c_n de la décomposition évoluent alors dans le temps sous la forme $c_n(0)e^{-iE_nt/\hbar}$. On a donc :

$$\rho_{nn}(t) = c_n(t)c_n(t)^* = c_n(0)c_n(0)^* = \rho_{nn}(0)$$

$$\rho_{np}(t) = c_n(t)c_p(t)^* = \rho_{np}(0)e^{-i(E_n - E_p)t/\hbar}$$

Les termes diagonaux (appelés "populations") ρ_{nn} sont constants, et les termes non-diagonaux (appelés "cohérences") ρ_{np} avec $n \neq p$ oscillent dans le temps à la fréquence de Bohr de la transition entre les deux niveaux considérés.

Exemple: Spin 1/2

Le vecteur d'état est de la forme :

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}|+\rangle_z + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}|-\rangle_z.$$

Cet état est aussi l'état propre $|+\rangle_{\vec{u}}$ de la projection du moment cinétique sur le vecteur unitaire \vec{u} de coordonnées sphériques (θ, ϕ) avec la valeur propre $+\hbar/2$. L'opérateur spin s'écrit $\hat{\mathbf{S}} = \hbar \vec{\sigma}/2$, où $\vec{\sigma}$ est l'opérateur vectoriel formé des trois matrices de Pauli, et par suite $\langle \vec{S} \rangle = \hbar \vec{u}/2$. On calcule facilement l'expression de la matrice densité qui lui est associée :

$$\hat{\rho}(\theta,\varphi) = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} \\ \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} & \sin^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

2 Cas d'un système composite

Considérons le cas d'un système composite, constitué de deux parties (1) et (2) qui peuvent être distinguées par des mesures que l'on peut faire sur la partie (1) sans affecter la partie (2) (ou inversement). C'est le cas notamment de deux particules (atomes, photons, ...) issues d'une source commune, ou qui ont interagi pendant un intervalle de temps donné, et qui se séparent physiquement ensuite, de façon suffisante pour que les appareils de mesures introduits sur une partie n'interagissent pas physiquement avec l'autre partie.

2.1 Notion de trace partielle

L'espace de Hilbert de ce système est le produit tensoriel des deux espaces de Hilbert $\mathcal{E} = \mathcal{E}(1) \otimes \mathcal{E}(2)$ de chacune des parties. Soient $\{|u_n(1)\rangle\}$ une base de $\mathcal{E}(1)$ et $\{|v_p(2)\rangle\}$ une base de $\mathcal{E}(2)$. L'opérateur densité $\hat{\rho}_{12}$ décrivant un état pur du système composite est donc un opérateur agissant dans cet espace \mathcal{E} . On définit alors la trace partielle de l'opérateur densité par :

$$\hat{\rho}(1) = Tr_2\hat{\rho}_{12} = \sum_{p} \langle v_p(2)|\hat{\rho}_{12}|v_p(2)\rangle.$$

Elle permet d'obtenir non pas un nombre, mais un opérateur agissant uniquement dans l'espace $\mathcal{E}(1)$. Elle est différente de la trace globale de l'opérateur, donnée par :

$$Tr\hat{\rho}_{12} = Tr_1(Tr_2\hat{\rho}_{12}) = Tr_2(Tr_1\hat{\rho}_{12}) = \sum_{np} \langle u_n(1), v_p(2) | \hat{\rho}_{12} | u_n(1), v_p(2) \rangle.$$

Cherchons maintenant à calculer la valeur moyenne d'un opérateur qui n'agit que sur l'espace $(1): \hat{A}(1) = \hat{A}(1) \otimes I(2)$, où I est l'opérateur identité.

$$\langle \hat{A}(1) \rangle = Tr\{\hat{\rho}_{12}\hat{A}(1)\}$$

$$= \sum_{n,p,n',p'} \langle u_n(1), v_p(2) | \hat{\rho}_{12} | u_{n'}(1), v_{p'}(2) \rangle \langle u_{n'}(1), v_{p'}(2) | \hat{A}(1) \otimes I(2) | u_n(1), v_p(2) \rangle$$

$$= \sum_{n,n'} \left[\sum_{p} \langle u_n(1), v_p(2) | \hat{\rho}_{12} | u_{n'}(1), v_p(2) \rangle \right] \langle u_{n'}(1) | \hat{A}(1) | u_n(1) \rangle$$

$$= Tr_1(\hat{\rho}(1)\hat{A}(1)). \tag{2}$$

Pour calculer la valeur moyenne de cet opérateur, on n'a donc pas besoin de connaître l'état du système total, mais uniquement la matrice densité réduite $\hat{\rho}(1)$, trace partielle de la matrice densité totale, et qui agit uniquement dans l'espace de Hilbert du système (1). Il est facile de voir que toutes les règles énoncées à la fin de (1.2) restent valables pour la matrice densité réduite (trace, valeur moyenne, évolution, hermiticité) sauf la dernière : on a maintenant : $\hat{\rho}(1)^2 \neq \hat{\rho}(1)$. La matrice densité réduite n'est plus un projecteur.

En conclusion, si un système quantique est "momentanément" isolé, même s'il a interagi précédemment avec un autre système et possède des corrélations avec cet autre système, on peut calculer tous les résultats de mesure relatifs à ce système à l'aide d'un objet caractérisant uniquement ce sous-système: c'est la matrice densité réduite, qui n'est plus un opérateur de projection sur un état quantique determiné. Cet objet "local" du système (1) ne peut évidemment pas nous renseigner sur les corrélations qui existent éventuellement entre les systèmes (1) et (2), pour lesquelles les renseignements supplémentaires sur le système contenus dans le vecteur d'état (ou la matrice densité) global sont indispensables.

2.2 Notion d'intrication

On dira que le système composite est dans un état intriqué ("entangled state") si la fonction d'onde du système $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ ne peut pas se mettre sous la forme d'un produit tensoriel de deux fonctions d'onde appartenant à chacun des sous espaces :

$$|\psi\rangle \neq |\psi(1)\rangle \otimes |\psi(2)\rangle$$

Si le système est dans un état produit tensoriel, une mesure sur sa partie (1) projettera l'ensemble du vecteur d'état sur l'état propre correspondant, et cette opération de "réduction du paquet d'onde" n'affectera pas la partie $|\psi(2)\rangle$ de l'état, donc les résultats des mesures effectuées sur la partie (2) : les mesures sur les parties (1) et (2) sont décorrélées. En revanche, si le système est dans un état intriqué, la réduction du paquet d'onde ayant lieu lors d'une mesure sur la partie (1) modifiera aussi les résultats de mesure effectués sur l'autre partie, même si les deux parties sont physiquement complètement indépendantes au moment de la mesure. Dans un état intriqué, on a de très fortes corrélations entre les mesures effectuées sur les parties (1) et (2).

Un état intriqué est toujours une superposition d'états séparables (décomposition de Schmidt):

$$|\psi\rangle_{12} = \sum_{n,p} c_{n,p} |u_n(1)\rangle \otimes |v_p(2)\rangle.$$

Exemple : Etat singulet d'un système de deux spins 1/2 :

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle - |-,+\rangle)$$

Les mesures de la composante selon Oz du moment cinétique de chacune des parties donnent des résultats aléatoires, mais toujours opposés pour les deux parties : il y a corrélation totale entre les mesures effectuées sur les deux sous-parties, même si celles-ci sont très séparées au moment de la mesure. Comme l'état singulet est de moment cinétique total nul, il est invariant par n'importe quelle rotation autour de l'origine, et donc une telle corrélation totale existe pour des mesures de la composante du moment cinétique selon n'importe quelle direction.

La matrice densité réduite qui décrit l'une des sous-parties est facile à calculer : on trouve que c'est l'opérateur identité divisé par deux. Cette matrice densité rend bien compte du fait que les mesures de \hat{S}_z donnent les résultats $\pm 1/2$ avec des probabilités égales, mais ne rend pas compte des corrélations avec l'autre sous-système.

Il est possible de quantifier le degré d'intrication d'un système composite d'une manière intrinsèque, c'est-à-dire par une mesure qui soit invariante sous l'effet de transformations unitaires internes aux espaces de Hilbert $\mathcal{E}(1)$ et $\mathcal{E}(2)$. Nous renvoyons le lecteur intéréssé au cours du Collège de France de Serge Haroche (2001-2002)[2].

3 Mélange statistique

3.1 Introduction

Comme en physique classique, il existe en physique quantique de nombreuses situations où l'on n'est pas en mesure de spécifier avec certitude l'état du système préparé. On peut simplement dire qu'on a préparé l'un quelconque des états $|\psi_i\rangle$ (i=1,...,P) avec une probabilité p_i . L'aspect statistique qui s'introduit ici est de nature classique : il est lié à l'imperfection de la préparation

du système, et non pas à l'incertitude quantique fondamentale qui existe même si le système initial est parfaitement déterminé. Les résultats des mesures effectuées sur ce système vont donc refléter la double incertitude, classique et quantique, du problème.

La valeur moyenne d'une observable À mesurée dans de telles conditions sera égale à :

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{i=1}^{P} p_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle = \sum_{i=1}^{P} p_i Tr(\hat{\rho}_i \hat{A}) = Tr(\hat{\rho}_m \hat{A})$$

Le "mélange statistique d'états" peut donc être décrit, avec la même règle de calcul pour les valeurs moyennes que pour les cas purs, par la matrice densité "moyenne" des différentes matrices densité possibles du système :

$$\hat{\rho}_m = \sum_{i=1}^P p_i \hat{\rho}_i.$$

3.2 Superposition d'états et mélange statistique

Il est important de bien saisir la différence entre deux objets au premier abord bien proches :

- la superposition cohérente d'états quantiques, décrite par le vecteur d'état :

$$|\Psi_{superp}\rangle = \sum_{i} \sqrt{p_i} e^{i\phi_i} |\psi_i\rangle$$

ou la matrice densité :

$$\rho_{superp} = \sum_{i,j} \sqrt{p_i p_j} e^{i(\phi_i - \phi_j)} |\psi_i\rangle \langle \psi_j|$$

- et le mélange statistique, décrit par la matrice densité :

$$\rho_{stat} = \sum_{i=1}^{P} p_i \rho_i$$

qui est la "partie diagonale" de la matrice densité précédente. La valeur moyenne d'une observable \hat{A} s'écrit dans les deux cas :

$$\langle \hat{A} \rangle_{superp} = \sum_{i,j} \sqrt{p_i p_j} e^{i(\phi_i - \phi_j)} \langle \psi_j | \hat{A} | \psi_i \rangle \qquad \langle \hat{A} \rangle_{stat} = \sum_i p_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle.$$

Ces deux objets donnent donc la même valeur moyenne à toute observable diagonale sur les états $|\psi_i\rangle$. Ils donnent en revanche des résultats très différents pour la valeur moyenne d'observables dont les éléments de matrice entre états $|\psi_i\rangle$ différents sont non nuls. La phase ϕ_i de la superposition joue alors un rôle déterminant dans la valeur moyenne de la mesure.

Les superpositions cohérentes d'états se rencontrent souvent dans les problèmes de physique microscopique, et on en a vu de nombreux exemples dans ce cours. Par contre, ces superpositions deviennent étranges, voire paradoxales, dès lors qu'on superpose des états macroscopiques : le "chat de Schrödinger", superposition d'un chat vivant et d'un chat mort, en est l'exemple le plus célèbre. Une telle superposition ne s'observe pas dans la vie de tous les jours (même s'il semble difficile de trouver une observable présentant un élément de matrice non nul entre l'"état" chat mort et l'"état" chat vivant). Il n'y a en revanche pas de problème à considérer un mélange statistique d'objets macroscopiques différents.

Pourquoi? La réponse à cette question a fait l'objet de nombreuses études [3], que l'on peut résumer comme suit : un système macroscopique n'est pas généralement un système fermé (c'est particulièrement vrai pour un chat). Il interagit de manière dissipative avec son environnement, et a de ce fait une évolution irréversible. Si le système est initialement dans une superposition cohérente d'états, on montre que l'interaction avec l'environnement conduit à une décohérence de cette superposition initiale, conduisant à un état final qui est un mélange statistique.

Le passage de la superposition cohérente au mélange statistique résulte de la trace sur les états non observés de l'environnement. Le temps caractéristique de décohérence dépend de manière critique de la taille du système. Pour des objets macroscopiques, la décohérence est presque instantanée. A la fin de ces notes, on trouvera un petit modèle de relaxation des cohérences de la matrice densité d'un système \mathcal{S} couplé à un réservoir \mathcal{R} .

3.3 Propriétés et exemples

Pour un mélange statistique,

- $-\rho$ est hermitien : $\rho = \rho^{\dagger}$. Il peut donc toujours être diagonalisé et de plus ses valeurs propres sont positives $(\lambda_i \geq 0)$.
- $-Tr\rho_m = \sum_i p_i = 1$
- ρ_m n'est plus nécessairement un projecteur $\rho_m^2 \neq \rho_m$, et $Tr\rho_m^2 \leq 1$. En effet, $Tr(\rho_m^2) = \sum_i p_i^2 \leq \sum_i p_i = 1$. $Tr(\rho^2) = 1$ est équivalent à dire que le système est un cas pur.
- Evolution temporelle :

$$\rho_m = \sum_i p_i \rho_i \qquad \Longrightarrow \qquad i\hbar \frac{d\rho_m}{dt} = [H, \rho_m]$$

On en déduit comme plus haut que les populations sont indépendantes du temps, et que les cohérences "tournent" dans le plan complexe à la fréquence de Bohr entre les deux niveaux considérés.

- $-\rho_{kk} \geq 0$ quelle que soit la base. En effet, $\rho_{kk} = Tr(\rho|k\rangle\langle k|)$ est la probabilité d'être dans l'état $k: \rho_{kk} = \sum_i p_i |\langle \psi_i | k \rangle|^2 \ge 0$. $-|\rho_{ij}|^2 \le \rho_{ii}\rho_{jj}$ (inégalité de Schwartz). Pour la démontrer, il suffit de remarquer que
- $\langle \psi | \rho | \psi \rangle \ge 1 \text{ avec } |\psi\rangle = |\psi_i\rangle + \eta |\psi_i\rangle.$

Toutes les propriétés démontrées pour un cas pur subsistent donc, à l'exception du caractère de projecteur de l'opérateur densité.

Exemple 1 : équilibre thermodynamique

Mélange statistique, système thermodynamique

Pour obtenir l'opérateur densité $\hat{\rho}$ d'un système en équilibre thermodynamique, soumis à un certain nombre de contraintes, on postule en mécanique statistique que $\hat{\rho}$ décrit un état qui ne contient pas plus d'information que celles fournies par les contraintes. Il faut donc pouvoir associer à $\hat{\rho}$ une quantité caractérisant l'information manquante dans l'état décrit par $\hat{\rho}$ puis déterminer $\hat{\rho}$ en maximisant cette information manquante, compte tenu des contraintes. L'entropie statistique de Von Neumann caractérise précisément cette information manquante dans l'état décrit par $\hat{\rho}$. Toute notre connaissance du système quantique considéré est donc fournie par l'opérateur matrice densité $\hat{\rho}$ (hermitique, semipositif et de trace unité). Diagonalisons la matrice densité $\hat{\rho}$ sous la forme :

$$\hat{\rho} = \sum_{m} p_m |\varphi_m\rangle\langle\varphi_m| \quad avec \quad \langle\varphi_m|\varphi_p\rangle = \delta_{pm},$$

et $p_m \ge 0$, $\sum_m p_m = 1$. Remarquons que plusieurs p_m peuvent être égaux du fait de dégénérescence. Von Neumann introduit l'entropie statistique $S(\hat{\rho})$ associée à $\hat{\rho}$:

$$S(\hat{\rho}) = -k_B \sum_{m} p_m \text{Log} p_m = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \text{Log} \hat{\rho}).$$

Ainsi pour un système quantique en équilibre thermique avec un thermostat à la température T la matrice densité est :

 $\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\hat{H}/k_B T}$

où $Z = Tr(e^{-\hat{H}/k_BT})$ est la fonction de partition du système. Il en résulte que $\rho_{nn} = \frac{1}{Z}e^{-E_n/k_BT}$ et $\rho_{np} = 0$.

Exemple 2 : mélange statistique non polarisé d'états d'un spin 1/2

Considérons un mélange statistique d'états d'un spin 1/2 états propres avec la valeur propre +1/2 de la projection du moment cinétique sur un vecteur unitaire de direction aléatoire, pointant de manière équirépartie dans toutes les directions de l'espace. Il s'agit d'un état qui ne possède pas de direction privilégiée (état non polarisé), qui va être décrit par la matrice densité:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \rho(\theta, \varphi) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \rho(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

La moyenne angulaire a brouillé les cohérences, et l'on n'est plus dans un cas pur puisque $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}/2$. On vérifie que $\langle S_i \rangle = 0$ pour i = x, y, z.

Remarquons qu'on peut obtenir la même matrice densité, et donc aboutir aux mêmes résultats de mesure, avec d'autres mélanges statistiques, comme un mélange de 50% de spins $|+1/2\rangle$ dans la direction Oz et de 50% de spins $|-1/2\rangle$ dans la direction Oz.

Un tel mélange statistique est l'analogue pour le spin 1/2 de la lumière dépolarisée, ou naturelle, mélange d'états de polarisation linéaire de directions équiréparties dans le plan transverse à la propagation.

Exemple 3: spins 1/2 à l'équilibre thermodynamique dans un champ magnétique statique L'hamiltonien du système s'écrit :

$$\hat{H} = -\mathbf{M}.\mathbf{B}_0 = -\gamma B_0 \hat{S}_z = \omega_0 \hat{S}_z.$$

Si le système est à l'équilibre thermodynamique, il a une probabilité $e^{-\hbar\omega_0/2k_BT}/Z$ d'être dans l'état $|+\rangle$ et $e^{\hbar\omega_0/2k_BT}/Z$ d'être dans l'état $|-\rangle$. D'où :

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} e^{-\hbar\omega_0/2k_BT} & 0\\ 0 & e^{\hbar\omega_0/2k_BT} \end{pmatrix}.$$

où $Z = 2\cosh(\hbar\omega_0/2k_BT)$. La nullité des éléments non diagonaux revient à dire que toutes les directions perpendiculaires à \mathbf{B}_0 (repérées par φ) sont équivalentes : $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$. De plus :

$$\langle \hat{S}_z \rangle = Tr(\hat{\rho}\hat{S}_z) = -\frac{\hbar}{2} \mathrm{tanh} \bigg(\frac{\hbar \omega_0}{2k_B T} \bigg).$$

Le spin acquiert une polarisation moyenne parallèle au champ dans lequel il est plongé, d'autant plus grande que B_0 est plus grand et que T est plus petit.

4 Modèle simple de relaxation des cohérences

4.1 Etablissement de l'équation pilote

Nous allons établir une équation pilote décrivant la relaxation d'un système S couplé à un réservoir R. L'hamiltonien du système est la somme d'un hamiltonien du système, du réservoir, et d'un terme d'interaction :

$$H = H_S + H_R + H_{SR}$$

On choisit une forme particulière du terme d'interaction, qui permet de mener des calculs simples, et qui de plus se rencontre souvent dans les cas réels. Il s'agit d'un terme qui est le produit d'une observable S du système et d'une observable R du réservoir : $H_{SR} = S.R$. L'équation du mouvement de l'opérateur densité ρ_{SR} du système global S + R est :

$$i\hbar \frac{d}{dt}\rho_{SR} = [H, \rho_{SR}]. \tag{3}$$

Nous déduirons de (3) l'équation d'évolution de l'opérateur densité réduit relatif au seul système $S: \rho_S(t) = Tr_R\rho_{SR}(t)$. On peut utiliser la représentation d'interaction pour isoler le rôle du terme de couplage H_{SR} :

$$\tilde{\rho}_{SR}(t) = e^{i(H_S + H_R)t/\hbar} \rho_{SR}(t) e^{-i(H_S + H_R)t/\hbar}$$

$$\tilde{S}(t) = e^{iH_St/\hbar} S e^{-iH_St/\hbar}$$

$$\tilde{R}(t) = e^{iH_Rt/\hbar} R e^{-iH_Rt/\hbar}$$

A partir de (3) on déduit :

$$i\hbar \frac{d}{dt}\tilde{\rho}_{SR} = [\tilde{S}(t)\tilde{R}(t), \tilde{\rho}_{SR}]. \tag{4}$$

Nous faisons les trois hypothèses suivantes sur l'état initial:

(i) Il y a factorisation initiale de l'état :

$$\rho_{SR}(0) = \rho_S(0)\rho_R(0)$$

(ii) Le réservoir est initialement dans un état stationnaire :

$$[\rho_R(0), H_R] = 0$$

(iii) La valeur movenne des observables du réservoir est nulle :

$$\langle R \rangle = Tr[R\rho_R(0)] = 0$$

La solution de (4) peut s'écrire sous forme intégrale :

$$\tilde{\rho}_{SR}(t) = \tilde{\rho}_{SR}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau [\tilde{S}(t-\tau)\tilde{R}(t-\tau), \tilde{\rho}_{SR}(t-\tau)]$$
 (5)

En reportant (5) dans (4), on obtient

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_{SR}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\tilde{S}(t)\tilde{R}(t), \tilde{\sigma}_{S}(0)\tilde{\sigma}_{R}(0)]
- \frac{1}{\hbar^{2}} \int_{0}^{t} d\tau [\tilde{S}(t)\tilde{R}(t), [\tilde{S}(t-\tau)\tilde{R}(t-\tau), \tilde{\rho}(t-\tau)]]$$
(6)

Prenons la trace des deux membres de l'équation(6) sur le réservoir. Compte tenu des hypothèses sur l'état initial, le premier terme du deuxième membre de (6) donne une contribution nulle et on obtient :

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau Tr_R \left\{ \left[\tilde{S}(t)\tilde{R}(t), \left[\tilde{S}(t-\tau)\tilde{R}(t-\tau), \tilde{\rho}(t-\tau) \right] \right] \right\}. \tag{7}$$

Jusqu'ici, aucune approximation n'a été faite. Pour aller plus loin, il faut en faire maintenant.

(i) Dans le deuxième membre de (7), on va écrire :

$$\tilde{\rho}_{SR} \simeq \tilde{\rho}_S(t-\tau)\rho_R(0).$$
 (8)

On néglige ainsi les corrélations entre S et \mathcal{R} à l'instant $t-\tau$ et on néglige la variation de l'état du grand réservoir entre 0 et $t-\tau$ sous l'effet du couplage avec le petit système (la vitesse de variation de l'équation (7) est en effet déjà d'ordre 2 par rapport au couplage H_{SR}). Notons cependant qu'on tient compte des corrélations entre S et R qui apparaissent entre t et $t-\tau$ et qui déterminent $d\tilde{\rho}_S(t)/dt$. En reportant (8) dans (7), et en explicitant le double commutateur, on obtient

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_{S}(t) = -\frac{1}{\hbar^{2}} \int_{0}^{t} d\tau \langle \tilde{R}(t)\tilde{R}(t-\tau)\rangle_{R}$$

$$\left\{ \tilde{S}(t)\tilde{S}(t-\tau)\tilde{\rho}_{s}(t-\tau) - \tilde{S}(t-\tau)\tilde{\rho}_{s}(t-\tau)\tilde{S}(t) + h.c. \right\}$$
(9)

οù

$$\langle \tilde{R}(t)\tilde{R}(t-\tau)\rangle_R = Tr_R \bigg\{ \rho_R(0)\tilde{R}(t)\tilde{R}(t-\tau) \bigg\}. \tag{10}$$

Le réservoir n'apparaît plus dans l'équation d'évolution opératorielle (9) de $\tilde{\rho}_S(t)$ que par l'intermédiaire des moyennes à deux temps (10). On suppose que le spectre des fréquences apparaissant dans l'évolution de \tilde{R} est très large (ce qui est naturel puisque \mathcal{R} est un réservoir). Il s'ensuit que les fonctions (10), qui ne dépendent que de τ (réservoir stationnaire), ont une largeur en τ très petite. Cette largeur τ_c est par définition le temps de corrélation du réservoir.

(ii) La présence de moyennes à deux temps (10) dans (9) limite les valeurs de τ dans l'intégrale à des valeurs de l'ordre de τ_c . Si τ_c est très court devant le temps d'évolution de $\tilde{\rho}_S$, on peut poser $\rho_S(t-\tau) \simeq \rho_S(t)$.

En repassant au point de vue de Schrödinger, et en remplaçant t par $+\infty$ car $t \gg \tau_c$, on obtient alors l'équation d'évolution de $\rho_S(t)$ suivante, appelée équation pilote :

$$\frac{d}{dt}\rho_{S}(t) = \frac{1}{i\hbar}[H_{S},\rho_{S}(t)] - \frac{1}{\hbar^{2}} \int_{0}^{\infty} d\tau \langle R\tilde{R}(-\tau)\rangle_{R} \left\{ S\tilde{S}(-\tau)\rho_{S}(t) - \tilde{S}(-\tau)\rho_{S}(t)S \right\} - \frac{1}{\hbar^{2}} \int_{0}^{\infty} d\tau \langle R\tilde{R}(-\tau)\rangle_{R} \left\{ \rho_{S}(t)\tilde{S}(-\tau)S - S\rho_{S}(t)\tilde{S}(-\tau) \right\}. \tag{11}$$

On peut montrer [1] que la condition de validité des approximations précédentes est $v\tau_c \ll \hbar$ où $v^2 = Tr\{H_{SR}^2 \rho_S(0)\rho_R(0)\}$. Cette condition est appelée condition de "rétrécissement par le mouvement".

4.2 Cas particulier

Supposons que l'observable S de S apparaissant dans le couplage H_{SR} commute avec H_S : $[S, H_S] = 0$. On en déduit que

$$\tilde{S}(-\tau) = e^{-iH_S\tau/\hbar} S e^{iH_S\tau/\hbar} = S. \tag{12}$$

Compte tenu de l'équation (12), on peut alors écrire (11) sous la forme

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \frac{1}{i\hbar}[H_S, \rho_S(t)] - \frac{(\alpha + i\beta)}{\hbar^2} \left\{ S^2 \rho_S(t) - S\rho_S(t)S \right\} - \frac{(\alpha - i\beta)}{\hbar^2} \left\{ \rho_S(t)S^2 - S\rho_S(t)S \right\},$$
(13)

où on a supposé $t \gg \tau_c$, et où le nombre complexe $\alpha + i\beta$ est défini par :

$$\alpha + i\beta = \int_0^\infty \langle R\tilde{R}(-\tau)\rangle_R$$

Par ailleurs, comme S et H_S commutent, il est possible de trouver une base $\{|\varphi_m\rangle\}$ de vecteurs propres communs à S et H_S :

$$H_S|\varphi_m\rangle = E_m|\varphi_m\rangle$$
 et $S|\varphi_m\rangle = s_m|\varphi_m\rangle$.

Projetons alors l'équation pilote (13) sur la base des $\{|\varphi_m\rangle\}$. Pour les populations $\langle \varphi_m|\rho_S|\varphi_m\rangle$, on obtient

$$\frac{d}{dt}\langle \varphi_m | \rho_S | \varphi_m \rangle = 0.$$

Pour les cohérences, $\langle \varphi_m | \rho_S | \varphi_p \rangle$ avec $m \neq p$, on obtient

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi_m|\rho_S|\varphi_p\rangle = -i\left[\frac{E_m - E_p}{\hbar} + \frac{\beta}{\hbar^2}(s_m^2 - s_p^2)\right]\langle\varphi_m|\rho_S|\varphi_p\rangle
- \frac{\alpha}{\hbar^2}(s_m - s_p)^2\langle\varphi_m|\rho_S|\varphi_p\rangle.$$
(14)

On voit que dans un tel système les populations sont figées et ne sont pas relaxées par le réservoir. Chaque état stationnaire $|\varphi_m\rangle$ est déplacé d'une quantité $\beta s_m^2/\hbar$. On peut intégrer cet effet de renormalisation des énergies en ajoutant à H un terme proportionnel à S^2 .

Par contre, la cohérence entre $|\varphi_m\rangle$ et $|\varphi_p\rangle$ est amortie avec un taux proportionnel au carré $(s_m - s_p)^2$ de la différence entre les valeurs propres de S.

On trouvera dans la référence [4] un lien intéressant entre phénomènes de relaxation et considérations sur l'information et la théorie de la mesure en mécanique quantique.

Références

- [1] Introduction à l'Electrodynamique quantique et processus d'interactions entre photons, et atomes, C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, InterEditions.
- [2] S. Haroche, cours du Collège de France : http://www.lkb.ens.fr/recherche/qedcav/college/college.html
- [3] The Physics of Quantum Information, D. Bouwmeester, A. Ekert, A. Zeilinger, Springer (2000)
- [4] R. Balian, American Journal of Physics, 57, 1019 (1989), R. Balian, European Journal of Physics, 10, 208 (1989)