Mécanique quantique II – Corrigé série 3

Préparé par Elisabeth Agoritsas (EP 018)

Récapitulation des concepts abordés dans cette série :

(**Exercice 1**) Relations de fermeture ; trace d'un opérateur ; équation de Schrödinger ; représentations de Schrödinger et d'Heisenberg ; évolution temporelle d'une moyenne d'observable ; théorème d'Ehrenfest ; commutateur d'observables conjuguées.

(**Exercice 2**) Définitions de l'oscillateur harmonique ; exponentielle d'un opérateur ; opérateur densité de température nulle et à l'équilibre thermique ; fonction de partition ; moyenne d'observable par rapport à l'opérateur densité.

(**Exercice 3**) Notation de Dirac *versus* représentation matricielle ; état pur *versus* mélange statistique ; système à deux niveaux (photons individuels ou intriqués),

1 Evolution des observables (Facultatif)

a) Trace d'un opérateur et changement de base. On considère deux bases orthonormales $\{|u_i\rangle\}$ et $\{|v_i\rangle\}$, qui en tant que bases *complètes* satisfont les *relations de fermeture* $\mathbb{I} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|$ et $\mathbb{I} = \sum_j |v_j\rangle\langle v_j|$. On peut toujours intercaler des relations de fermeture entre opérateurs puisque elles sont égales à l'identité $\mathbb{I}$.

La trace d'un opérateur ne dépend pas de la base choisie pour la calculer, ce qui nous permet de choisir par exemple la base des états propres de l'opérateur considéré (on peut alors remplacer ce dernier par ses valeurs propres). En effet, en explicitant la trace d'un opérateur $\hat{A}$:

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\{\hat{A}\} &= \sum_i \langle u_i|\hat{A}|u_i\rangle = \sum_i \langle u_i| \underbrace{\left(\sum_j |v_j\rangle\langle v_j|\right)}_{=\mathbb{I}} \hat{A} \underbrace{\left(\sum_k |v_k\rangle\langle v_k|\right)}_{=\mathbb{I}} |u_i\rangle \\
&= \sum_{ijk} \langle u_i|v_j\rangle\langle v_j|\hat{A}|v_k\rangle\langle v_k|u_i\rangle = \sum_{ijk} \langle v_j|\hat{A}|v_k\rangle\langle v_k|u_i\rangle\langle u_i|v_j\rangle \\
&= \sum_{jk} \langle v_j|\hat{A}|v_k\rangle\langle v_k| \underbrace{\left(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\right)}_{=\mathbb{I}} |v_j\rangle = \sum_{jk} \langle v_j|\hat{A}|v_k\rangle \underbrace{\langle v_k|v_j\rangle}_{\delta_{kj}} = \sum_j \langle v_j|\hat{A}|v_j\rangle \\
\iff &\quad \boxed{\mathrm{Tr}\{\hat{A}\} = \sum_i \langle u_i|\hat{A}|u_i\rangle = \sum_j \langle v_j|\hat{A}|v_j\rangle}
\end{aligned} \tag{1}$$

b) Représentations de Schrödinger et d'Heisenberg. (Cf. cours.) Si l'Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_0$ d'un système est indépendant du temps t, alors l'équation de Schrödinger prédit une évolution temporelle d'une état quantique selon $|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_0 t}|\Psi_0\rangle$. Lorsqu'on considère l'évolution d'une moyenne d'observable $\hat{\mathcal{O}}$ sur cet état quantique, on peut alors soit regrouper la dépendance temporelle dans l'état (représentation de Schrödinger), soit dans l'observable (représentation d'Heisenberg) :

$$\left\langle \hat{\mathcal{O}} \right\rangle_t \equiv \langle\Psi(t)|\hat{\mathcal{O}}|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi_0| \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_0 t}\hat{\mathcal{O}}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_0 t}}_{=\hat{\mathcal{O}}_{\mathrm{H}}(t)} |\Psi_0\rangle = \langle\Psi_0|\hat{\mathcal{O}}_{\mathrm{H}}(t)|\Psi_0\rangle \tag{2}$$

c) Dérivée temporelle d'une moyenne d'observable. (Cf. pp.240-241 du Cohen-Tannoudji, tome I.) On considère en toute généralité une observable qui peut dépendre explicitement du temps $\hat{A}(t)$ et un système d'Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}(t)$. On explicite ici la dérivée temporelle *totale* de la moyenne de l'observable sur l'état $|\Psi(t)\rangle$ grâce à l'équation de Schrödinger et sa version adjointe ($\partial_t|\Psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}(t)|\Psi(t)\rangle$ et $\partial_t\langle\Psi(t)| = \langle\Psi(t)|\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}(t)$). En dépit des dépendances temporelles explicites, on travaille en représentation de Schrödinger :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\left\langle \hat{A}(t)\right\rangle_t &= \frac{d}{dt}\left[\langle\Psi(t)|\hat{A}(t)|\Psi(t)\rangle\right] \\
&= \left[\frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\right]\hat{A}(t)|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|\hat{A}(t)\left[\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle\right] + \langle\Psi(t)|\partial_t\hat{A}(t)|\Psi(t)\rangle \\
&= \langle\Psi(t)|\left\{\frac{1}{i\hbar}\left(-\hat{\mathcal{H}}(t)\hat{A}(t) + \hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}}(t)\right) + \partial_t\hat{A}(t)\right\}|\Psi(t)\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{A}(t),\hat{\mathcal{H}}(t)\right]\right\rangle_t + \left\langle\partial_t\hat{A}(t)\right\rangle_t
\end{aligned} \tag{3}$$

Le commutateur de l'observable $\hat{A}(t)$ et de l'Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}(t)$ est donc la quantité centrale à calculer pour déterminer l'évolution temporelle de la moyenne de l'observable $\left\langle\hat{A}(t)\right\rangle_t$, à quoi vient s'ajouter le terme $\partial_t\hat{A}(t)$ lorsque l'observable a une dépendance temporelle intrinsèque.

d) *Montrez que la représentation d'Heisenberg de $\hat{A}$ est indépendante du temps t si sa représentation de Schrödinger est une constante du mouvement.*

$\hat{A}$ est une constante du mouvement si sa moyenne $\left\langle\hat{A}\right\rangle_t$ est une constante, autrement dit si $\frac{d}{dt}\left\langle\hat{A}(t)\right\rangle_t = 0$ pour toute condition initiale $|\Psi(t=0)\rangle$.

Par (3) on voit que cela est équivalent à ce que l'observable commute avec l'Hamiltonien (supposé indépendant du temps) : $\left[\hat{A},\hat{\mathcal{H}}_0\right] = 0$.

Par conséquent, sa représentation d'Heisenberg ne dépend pas du temps :

$$\hat{A}_{\mathrm{H}}(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} = \hat{A}e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar}e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} = \hat{A} \quad\Longleftrightarrow\quad \hat{A}_{\mathrm{H}}(t) = \hat{A} = \hat{A}(t=0) \tag{4}$$

e) Théorème d'Ehrenfest. L'expression (3) peut être utilisée par exemple sur les observables position $\hat{R}$ et quantité de mouvement $\hat{P}$ pour une particule sans spin et de masse m plongée dans un potentiel externe, d'Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{R})$. Les équations d'évolution de $\left\langle\hat{R}\right\rangle_t$ et $\left\langle\hat{P}\right\rangle_t$ constituent le *théorème d'Ehrenfest* (cf. pp.242-244 du Cohen-Tannoudji, tome I).

Les observables $\hat{R}$ et $\hat{P}$ n'ont pas de dépendance temporelle explicite, donc (3) devient :

$$\frac{d}{dt}\left\langle\hat{R}\right\rangle_t = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{R},\hat{\mathcal{H}}\right]\right\rangle_t = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2m}\left\langle\left[\hat{R},\hat{P}^2\right]\right\rangle_t + \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{R},V(\hat{R})\right]\right\rangle_t = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2m}\left\langle\left[\hat{R},\hat{P}^2\right]\right\rangle_t \tag{5}$$

$$\frac{d}{dt}\left\langle\hat{P}\right\rangle_t = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{P},\hat{\mathcal{H}}\right]\right\rangle_t = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2m}\left\langle\left[\hat{P},\hat{P}^2\right]\right\rangle_t + \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{P},V(\hat{R})\right]\right\rangle_t = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{P},V(\hat{R})\right]\right\rangle_t \tag{6}$$

où on a utilisé que $\left[\hat{R},V(\hat{R})\right] = 0$ et $\left[\hat{P},\hat{P}^2\right] = 0$ (puisqu'un opérateur commute avec lui-même !).

Pour simplifier les deux commutateurs restants, on utilise la relation de commutation entre variables conjuguées $\left[\hat{R},\hat{P}\right] = i\hbar \Leftrightarrow \hat{R}\hat{P} = \hat{P}\hat{R} + i\hbar$:

$$\left[\hat{R},\hat{P}^2\right] = \hat{R}\hat{P}\hat{P} - \hat{P}\underbrace{\hat{P}\hat{R}}_{\hat{R}\hat{P}-i\hbar} = \underbrace{\left[\hat{R},\hat{P}\right]}_{i\hbar}\hat{P} + i\hbar\hat{P} = 2i\hbar\hat{P} \quad\Rightarrow\quad \boxed{\frac{d}{dt}\left\langle\hat{R}\right\rangle_t = \frac{1}{m}\left\langle\hat{P}\right\rangle_t} \tag{7}$$

De même, pour le commutateur $\left[\hat{P}, V(\hat{R})\right]$, on commence par écrire un développement formel du potentiel $V(\hat{R})$ en série entière, puis on applique itérativement la relation de commutation, et enfin on reconnaît la série entière de $\nabla V(\hat{R})$ (en se calquant sur $f(x) = \sum_n f_n\, x^n$ qui implique $f'(x) = \sum_n n f_n x^{n-1}$). Ainsi :

$$\left[\hat{P}, V(\hat{R})\right] = \left[\hat{P}, \sum_n V_n \hat{R}^n\right] = \sum_n V_n \left[\hat{P}, \hat{R}^n\right] = \cdots = -i\hbar \sum_n n V_n\, \hat{R}^{n-1} = -i\hbar \nabla V(\hat{R}) \tag{8}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{d}{dt}\left\langle \hat{P} \right\rangle_t = -\left\langle \nabla V(\hat{R}) \right\rangle_t} \tag{9}$$

On détaille l'étape intermédiaire :

$$\begin{aligned}
\hat{P}\hat{R}^n - \left[\hat{P}, \hat{R}^n\right] &= \hat{R}^n \hat{P} = \hat{R}^{n-1} \underbrace{\hat{R}\hat{P}}_{\hat{P}\hat{R}+i\hbar} = \hat{R}^{n-1}\hat{P}\hat{R} + i\hbar \hat{R}^{n-1} \\
&= \hat{R}^{n-2} \underbrace{\hat{R}\hat{P}}_{\hat{P}\hat{R}+i\hbar} \hat{R} + i\hbar\hat{R}^{n-1} = \hat{R}^{n-2}\hat{P}\hat{R}^2 + 2i\hbar\hat{R}^{n-1} \\
&= \hat{R}^{n-3} \underbrace{\hat{R}\hat{P}}_{\hat{P}\hat{R}+i\hbar} \hat{R}^2 + 2i\hbar\hat{R}^{n-1} = \hat{R}^{n-3}\hat{P}\hat{R}^3 + 3i\hbar\hat{R}^{n-1} = \cdots = \hat{P}\hat{R}^n + n \cdot i\hbar\,\hat{R}^{n-1}
\end{aligned}$$

Cf. pp.242-244 du Cohen-Tannoudji, tome I, pour une discussion détaillée de l'interprétation physique de ces expressions. $\left\langle \hat{R} \right\rangle_t$ et $\left\langle \hat{P} \right\rangle_t$ sont respectivement la position et la quantité de mouvement moyennes de l'état $|\Psi\rangle$. (7) établit que l'évolution de la position moyenne d'un paquet d'onde est donnée par sa quantité de mouvement moyenne. (9) établit de même que l'évolution de la quantité de mouvement moyenne est donnée par le gradient de potentiel moyenné sur tout le paquet d'onde :

$$\begin{aligned}
\left\langle \nabla V(\hat{R}) \right\rangle_t &= \langle \Psi(t)|\nabla V(\hat{R})|\Psi(t)\rangle = \int dr_1\, dr_2 \underbrace{\langle \Psi(t)|r_1\rangle}_{\Psi(r_1,t)^*} \underbrace{\langle r_1|\nabla V(\hat{R})|r_2\rangle}_{\nabla V(r_1)\delta(r_1-r_2)} \underbrace{\langle r_2|\Psi(t)\rangle}_{\Psi(r_2,t)} \\
&= \int dr\, |\Psi(r,t)|^2\, \nabla V(r) \neq \nabla V(< \hat{R} >_t)
\end{aligned} \tag{10}$$

Si le paquet d'onde est très localisé, la moyenne du gradient ($\left\langle \nabla V(\hat{R}) \right\rangle_t$) peut être approximée par le gradient de la position moyenne ($\nabla V(< \hat{R} >_t)$) : dans cette approximation *semi-classique*, on retrouve les équations de mouvement d'une particule classique. Mais plus généralement, on voit qu'il faut tenir compte de tout l'étalement spatial de la fonction d'onde (donc du potentiel qu'elle explore) pour décrire l'évolution de sa position moyenne.

Une dernière remarque : la dérivation ci-dessus se généralise à toute paire d'observables conjuguées $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i\hbar$ pour un Hamiltonien de la forme $\hat{\mathcal{H}} = \hat{A}^2 + V(\hat{B})$ en supposant que le "potentiel" V admet un développement analytique.

2 Equilibre thermique d'un oscillateur harmonique

a) Rappels par rapport à la base $\{|n\rangle\}$. On rappelle les relations de récurrence qui permettent de reconstruire à partir du fondamental $|0\rangle$ toute la base des états propres $\{|n\rangle\}_{n\in\mathbb{N}}$ de l'Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega_0 \left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right)$:

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\,, \quad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle\,, \quad |n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \tag{11}$$

On peut en déduire explicitement que l'opérateur $\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$ permet d'indexer les états propres selon $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$:

$$\hat{n}|n\rangle \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle \begin{cases} \overset{(n=0)}{=} \hat{a}^\dagger \underbrace{\hat{a}|0\rangle} = \hat{a}^\dagger\, 0 \cdot |0\rangle = 0 = 0 \cdot |0\rangle \\ \overset{(n\in\mathbb{N}^*)}{=} \hat{a}^\dagger \underbrace{\hat{a}|n\rangle} = \hat{a}^\dagger \sqrt{n} \cdot |n-1\rangle = \sqrt{n} \cdot \underbrace{\hat{a}^\dagger|n-1\rangle} = \sqrt{n}\sqrt{n-1+1}|n\rangle = n \cdot |n\rangle \end{cases} \tag{12}$$

On en déduit immédiatement pour l'Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ et son exponentielle $e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}$:

$$\hat{\mathcal{H}}|n\rangle = \hbar\omega_0(\hat{n} + \frac{1}{2})|n\rangle = \underbrace{\hbar\omega_0(n + \frac{1}{2})}_{\equiv E_n}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad \Rightarrow \quad e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}|n\rangle = e^{-\beta E_n}|n\rangle \tag{13}$$

On peut vérifier cette dernière égalité en utilisant la définition de l'exponentielle d'un opérateur, qui est la généralisation de la série entière de l'exponentielle "classique" :

$$e^{\hat{A}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^k}{k!} \quad \Rightarrow \quad e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^k}{k!}\hat{\mathcal{H}}^k \tag{14}$$

On peut alors ajouter autant de relation de fermeture $\mathbb{I} = \sum_{n_k} |n_k\rangle\langle n_k|$ que nécessaire pour transformer tous les opérateurs $\hat{\mathcal{H}}$ en leurs valeurs propres E_{n_k}, puis simplifier les expressions jusqu'à reconnaître l'exponentielle $e^{-\beta E_n}$:

$$\begin{aligned} e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^k}{k!} \sum_{n_1,\dots,n_{k+1}} |n_1\rangle \underbrace{\langle n_1|\hat{\mathcal{H}}_{(1)}|n_2\rangle}_{E_{n_1}\cdot\delta_{n_1n_2}} \underbrace{\langle n_2|\hat{\mathcal{H}}_{(2)}|n_3\rangle}_{E_{n_2}\cdot\delta_{n_2n_3}} \langle n_3| \dots |n_k\rangle \underbrace{\langle n_k|\hat{\mathcal{H}}_{(k)}|n_{k+1}\rangle}_{E_{n_k}\cdot\delta_{n_kn_{k+1}}} \langle n_{k+1}| \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^k}{k!} \sum_{n_1,\dots,n_{k+1}} \underbrace{E_{n_1}\cdot(\cdots)\cdot E_{n_k}} \cdot \underbrace{\delta_{n_1n_2}\cdot(\cdots)\cdot\delta_{n_kn_{k+1}}} |n_1\rangle\langle n_{k+1}| \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^k}{k!} \sum_n E_n^k|n\rangle\langle n| = \sum_n \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta E_n)^k}{k!}\right] |n\rangle\langle n| = \sum_n e^{-\beta E_n}|n\rangle\langle n| \end{aligned}$$

autrement dit

$$\boxed{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} = \sum_n e^{-\beta E_n}|n\rangle\langle n|} \quad \Rightarrow \quad e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}|m\rangle = \sum_n e^{-\beta E_n}|n\rangle \underbrace{\langle n|m\rangle}_{\delta_{nm}} = e^{-\beta E_m}|m\rangle \tag{15}$$

NB. Grâce à la notation de Dirac, on a pu montrer cette expression pour un Hamiltonien générique ; le cas spécifique de l'oscillateur harmonique ne sera étudié qu'à partir du point suivant.

b) Opérateur densité de température nulle. Dans la limite de température nulle, l'opérateur densité est le projecteur de l'état de plus basse énergie, autrement dit du fondamental du système. En effet, on peut réécrire en tout généralité l'opérateur densité d'un Hamiltonien d'énergies propres $E_0 \leq E_1 \leq \dots \leq E_n \leq \dots$ en isolant les poids de Boltzmann associé à E_0 :

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z} = \frac{e^{-\beta E_0}\sum_n e^{-\beta(E_n-E_0)}|n\rangle\langle n|}{e^{-\beta E_0}\sum_n e^{-\beta(E_n-E_0)}} \tag{16}$$

Comme par définition $E_n - E_0 \geq 0$, lorsque la température $T \to 0$ ou $\beta \to \infty$ on a tous les poids de Boltzmann $e^{-\beta(E_n-E_0)} \to 0$ sauf si $n = 0$, autrement dit seul le poids de $|0\rangle\langle 0|$ est non-nul à température nulle :

$$\hat{\rho} \overset{(T\to 0)}{=} \frac{e^{-\beta E_0}|0\rangle\langle 0|}{e^{-\beta E_0}\cdot 1} = |0\rangle\langle 0| \tag{17}$$

Dans le cas de l'oscillateur harmonique, le fondamental $|0\rangle$ a une énergie $E_{n=0} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ et la fonction d'onde $\langle x|0\rangle = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega_0^2x^2}{2\hbar}}$.

c) Fonction de partition. On commence par la définition de la fonction de partition :

$$Z \equiv \mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\} = \sum_n \langle n| \underbrace{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}|n\rangle} = \sum_n e^{-\beta E_n} \underbrace{\langle n|n\rangle}_{=1} = \sum_n e^{-\beta E_n} \tag{18}$$

et dans le cas de l'oscillateur harmonique, on reconnaît une série géométrique $\frac{1}{1-x} = \sum_{k=0}^{\infty} x^k$ de rayon de convergence $|x| < 1$, en posant $x = e^{-\beta\hbar\omega_0}$:

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-\beta\hbar\omega_0}\right)^n e^{-\beta\hbar\omega_0/2} = e^{-\beta\hbar\omega_0/2} \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}} = \left[2\sinh\left(\beta\hbar\omega_0/2\right)\right]^{-1} \tag{19}$$

Ceci n'est vrai que si la condition de convergence de la série est satisfaite, à savoir $0 \leq e^{-\beta\hbar\omega_0} < 1$, ce qui est bien le cas puisque $\beta\hbar\omega_0 > 0$ pour toute température $T < \infty$.

d) Opérateur densité à l'équilibre thermique. L'opérateur densité à l'équilibre thermique est donné par

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z}\exp(-\beta\hat{\mathcal{H}}) = \sum_n \underbrace{\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}} |n\rangle\langle n| \equiv \sum_n P_n |n\rangle\langle n| \quad \Rightarrow \quad P_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \tag{20}$$

En combinant les énergies $E_n = \hbar\omega_0(n + \frac{1}{2})$ et la fonction de partition obtenue au point précédent, on obtient pour un oscillateur harmonique les probabilités :

$$P_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} = e^{-\beta\hbar\omega_0(n+\frac{1}{2})} \frac{1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}}{e^{-\beta\hbar\omega_0/2}} = e^{-n\beta\hbar\omega_0}\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}\right) \tag{21}$$

e) Nombre moyen de quantas d'énergie $\langle\hat{n}\rangle$. La moyenne de l'opérateur $\hat{n}$ pour le mélange statistique à l'équilibre thermique est donné par

$$\langle\hat{n}\rangle = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\hat{n}\} = \sum_n \underbrace{\langle n|\hat{\rho}}\,\underbrace{\hat{n}|n\rangle} = \sum_n P_n^* n \underbrace{\langle n|n\rangle}_{=1} = \sum_n n P_n \tag{22}$$

avec $P_n^* = P_n$ puisque les probabilités sont réelles. Dans le cas de l'oscillateur harmonique on doit calculer :

$$\langle\hat{n}\rangle = \sum_n n P_n = \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-n\beta\hbar\omega_0}\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}\right) = \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}\right)\sum_{n=0}^{\infty} n \left(e^{-\beta\hbar\omega_0}\right)^n \tag{23}$$

On peut à nouveau reconnaître une série entière à l'aide de l'identité $\frac{x}{(1-x)^2} = \sum_{k=0}^{\infty} k\, x^k$ de rayon de convergence $0 < |x| < 1$, en posant comme au point **c)** $x = e^{-\beta\hbar\omega_0}$ (avec la même condition de convergence satisfaite pour toute température finie) :

$$\langle\hat{n}\rangle = \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}\right)\frac{e^{-\beta\hbar\omega_0}}{\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}\right)^2} = \frac{e^{-\beta\hbar\omega_0}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}} = \frac{1}{e^{+\beta\hbar\omega_0} - 1} \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{\langle\hat{n}\rangle = \frac{1}{e^{+\beta\hbar\omega_0} - 1}} \tag{24}$$

Dans la limite de *basse* température $\hbar\omega_0 \gg k_B T$, on a $e^{\hbar\omega_0/k_BT} \gg 1$ et donc

$$\langle\hat{n}\rangle \approx 1/\mathrm{e}^{\hbar\omega_0/k_BT} = \mathrm{e}^{-\hbar\omega_0/k_BT} \ll 1. \tag{25}$$

Cette situation correspond au cas où l'énergie fournie par le réservoir de chaleur ($= k_B T$) est beaucoup plus petite que la séparation entre le niveau fondamental et le premier niveau excité.

Par conséquent, l'oscillateur a très peu de chance d'être dans un état excité et le nombre moyen de quanta d'énergie tend vers zéro pour $T \to 0$.

Dans la limite de *haute* température $\hbar\omega_0 \ll k_B T$, on a $e^{\hbar\omega_0/k_B T} \approx 1 + \hbar\omega_0/k_B T$ et donc

$$\langle \hat{n} \rangle \approx \frac{1}{1 + \hbar\omega_0/k_B T - 1} = k_B T/\hbar\omega_0 \gg 1 \tag{26}$$

Ici, l'énergie thermique est beaucoup plus grande que la séparation entre les niveaux, et le nombre de quanta d'énergie est simplement proportionnel à la température comme dans un oscillateur classique.

f) Energie moyenne de l'oscillateur $\left\langle \hat{\mathcal{H}} \right\rangle$. La moyenne de l'Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ pour le mélange statistique à l'équilibre thermique est directement reliée à la moyenne du nombre de quanta :

$$E = \left\langle \hat{\mathcal{H}} \right\rangle = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\hat{\mathcal{H}}\} = \hbar\omega_0 \left(\langle \hat{n} \rangle + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega_0 \left(\frac{1}{e^{+\beta\hbar\omega_0} - 1} + \frac{1}{2} \right) \tag{27}$$

Les limites de haute et basse températures se traduisent pour l'énergie moyenne respectivement en $E^{\text{high } T} \approx k_B T$ et $E^{\text{low } T} \approx \frac{1}{2}\hbar\omega_0 = E_{n=0}$: on retrouve bien que dans la limite de température nulle l'énergie moyenne du système est l'énergie du niveau fondamental (cf. point **b)**).

g) Reformulation des probabilités P_n. Pour montrer que $P_n = \frac{\langle \hat{n} \rangle^n}{(1+\langle n \rangle)^{n+1}}$, on peut soit y substituer (27) et vérifier que cette relation est satisfaite, soit partir des probabilités (24) et y faire apparaître la moyenne $\langle \hat{n} \rangle$ en jouant avec les facteurs exponentiels $e^{\pm\beta\hbar\omega_0}$:

$$\begin{aligned} P_n &\overset{(24)}{=} e^{-n\beta\hbar\omega_0} \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega_0} \right) = \left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega_0}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}} \right)^n \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega_0} \right)^{n+1} \\ &= \left(\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_0} - 1} \right)^n \left(\frac{1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_0} + e^{-\beta\hbar\omega_0}} \right)^{n+1} = \left(\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_0} - 1} \right)^n \left(1 + \frac{e^{-\beta\hbar\omega_0}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}} \right)^{-(n+1)} \\ &= \left(\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_0} - 1} \right)^n \left(1 + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_0} - 1} \right)^{-(n+1)} = \frac{\langle \hat{n} \rangle^n}{(1 + \langle \hat{n} \rangle)^{n+1}} \end{aligned} \tag{28}$$

h) Exemple expérimental quantitatif. *Expérimentalement, il est possible de refroidir de petits objets macroscopiques à des températures d'environ 100 mK à l'aide d'un réfrigérateur à dilution. Quelle doit être la fréquence $f_0 = \frac{\omega_0}{2\pi}$ de résonance de l'oscillateur pour que $\langle \hat{n} \rangle = 0.1$ à cette température ? Quelle est la probabilité que l'oscillateur se trouve dans son état fondamental ? Dans le premier niveau ? Dans le deuxième ?*

*Note : Le refroidissement d'un oscillateur mécanique macroscopique dans son état fondamental a été démontré pour la première fois en 2010 à l'aide d'un matériau piezoélectrique vibrant a une radio-fréquence de 6 GHz, cf. Nature **464**, 697-703 (2010).*

On pose $\langle \hat{n} \rangle = 0.1 = 1/\left(\mathrm{e}^{\hbar\omega_0/k_B T} - 1 \right)$, et on détermine la fréquence $f_0 = \omega_0/2\pi$ correspondante :

$$f_0 = \frac{k_B T}{2\pi\hbar} \ln\left(\frac{1}{\langle \hat{n} \rangle} + 1 \right) = 5 \text{ GHz}. \tag{29}$$

On obtient P_0, P_1 et P_2 facilement à partir de l'expression de P_n en fonction de $\langle \hat{n} \rangle$. On calcule $P_0 \approx 90.9\%$, $P_1 \approx 8.3\%$ et $P_2 \approx 0.75\%$.

3 Opérateur densité d'un photon polarisé

a) Opérateur densité sous forme matricielle. Dans la base $\{|H\rangle, |V\rangle\}$ un état pur quelconque $|\psi_i\rangle = a_i|H\rangle + b_i|V\rangle$ prend la forme d'un vecteur $|\psi_i\rangle = \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \end{pmatrix}$, et donc son projecteur prend la forme d'une matrice 2×2 :

$$|\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \end{pmatrix} (a_i^*, b_i^*) = \begin{pmatrix} |a_i|^2 & a_i b_i^* \\ a_i^* b_i & |b_i|^2 \end{pmatrix} \quad \text{avec } |a_i|^2 + |b_i|^2 = 1 \tag{30}$$

On a bien en particulier que $|H\rangle\langle H| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ et $|V\rangle\langle V| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. Un opérateur densité générique $\hat{\rho} = \sum_{i=1}^n p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ prend donc la forme matricielle :

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^n p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sum_{i=1}^n p_i \begin{pmatrix} |a_i|^2 & a_i b_i^* \\ a_i^* b_i & |b_i|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n p_i |a_i|^2 & \sum_{i=1}^n p_i a_i b_i^* \\ \sum_{i=1}^n p_i a_i^* b_i & \sum_{i=1}^n p_i |b_i|^2 \end{pmatrix} \tag{31}$$

La trace d'une matrice est la somme de ses éléments diagonaux, donc par normalisation des états $|\psi_i\rangle$ et des probabilités p_i :

$$\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\} = \sum_{i=1}^n p_i \underbrace{\left(|a_i|^2 + |b_i|^2\right)}_{=1 \text{ par norm. de } |\psi_i\rangle} = \underbrace{\sum_{i=1}^n p_i = 1}_{\text{par norm. des proba.}} \quad \Longleftrightarrow \quad \boxed{\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\} = 1} \quad \sharp \tag{32}$$

b) Calcul de $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}^2\}$: état pur ou mélange statistique ? *Le calcul de* $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}^2\}$ *donne un critère pour déterminer la nature de l'état* : l'état de polarisation d'un photon est pur si et seulement si $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}^2\} = 1$, et est un mélange statistique “impur” si et seulement si $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}^2\} < 1$. Pour montrer la première équivalence, il faut faire la preuve dans les deux directions logiques.

[Etat pur $\Rightarrow \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}^2\} = 1$] : Si $\hat{\rho}$ décrit un état pur $|\psi\rangle$, on peut l'écrire sous la forme d'un projecteur $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, dont le carré redonne le projecteur : $\hat{\rho}^2 = (|\psi\rangle\langle\psi|)(|\psi\rangle\langle\psi|) = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{\rho}$ (car l'état $|\psi\rangle$ est normalisé : $\langle\psi|\psi\rangle = 1$), et donc $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}^2\} = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\} = 1$.

[$\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}^2\} = 1 \Rightarrow$ Etat pur] : On choisit de travailler sur une base orthonormée $\{\psi_i\}$, et on explicite la condition sur la trace :

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}^2\} &= \mathrm{Tr}\left\{\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \sum_j p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|\right\} = \mathrm{Tr}\left\{\sum_{ij} p_i p_j \, |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi_j\rangle\langle\psi_j|\right\} \\ &= \sum_{ijk} p_i p_j \underbrace{\langle\psi_k|\psi_i\rangle}_{\delta_{ki}} \underbrace{\langle\psi_i|\psi_j\rangle}_{\delta_{ij}} \underbrace{\langle\psi_j|\psi_k\rangle}_{\delta_{jk}} = \sum_i p_i^2 \end{aligned} \tag{33}$$

Les probabilités sont normalisées donc $\sum_i p_i = 1$ et si on impose que $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}^2\} = 1$, on a :

$$0 = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}^2\} - \sum_i p_i = \sum_i \underbrace{\underbrace{p_i}_{\geq 0} \underbrace{(p_i - 1)}_{\leq 0}}_{\leq 0} \quad \Rightarrow \quad p_i(p_i - 1) = 0 \; \forall i \tag{34}$$

Donc l'un des p_i vaut 1 et tous les autres valent 0 pour que leur somme vale 1, autrement dit $\hat{\rho} = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$.

c) Exemples de mélanges statistiques. Mélange statistique de $|H\rangle$ et $|V\rangle$ avec probabilité de 50% chacun :

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{HV} &= \frac{1}{2}\left(|H\rangle\langle H| + |V\rangle\langle V|\right) = \frac{1}{2}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix}\right] \\ &= \frac{1}{2}\left[\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}\right] = \frac{1}{2}\mathbb{I}\end{aligned} \tag{35}$$

Mélange statistique de $|+\rangle = \frac{|H\rangle+|V\rangle}{\sqrt{2}}$ et $|-\rangle = \frac{|H\rangle-|V\rangle}{\sqrt{2}}$ avec probabilité de 50% chacun :

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{+-} &= \frac{1}{2}\left(|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|\right) = \frac{1}{4}\left[\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & -1\end{pmatrix}\right] \\ &= \frac{1}{4}\left[\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1 & -1\\-1 & 1\end{pmatrix}\right] = \frac{1}{2}\mathbb{I}\end{aligned} \tag{36}$$

L'opérateur densité prend la même forme matricielle dans ces deux exemples $\hat{\rho}_{HV} = \hat{\rho}_{+-} = \frac{1}{2}\mathbb{I}$. Il s'agit bien de mélanges statistiques au sens du point **c)**, puisque $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}^2_{HV}\} = \frac{1}{4}\mathrm{Tr}\{\mathbb{I}^2\} = \frac{1}{2} < 1$. La connaissance que l'observateur possède sur l'état de polarisation du photon est nulle ; ceci est toujours le cas lorsque le photon est préparé dans un mélange statistique équiprobable de deux états orthogonaux. Ceci correspond à une entropie de von Neumann de $\ln(2)$.

d) Exemple d'un état pur. L'opérateur densité d'un photon de polarisation dans l'état pur $|+\rangle$ prend la forme matricielle, dans la base $\{|H\rangle, |V\rangle\}$, du projecteur de cet état :

$$\hat{\rho}_{|+\rangle} = |+\rangle\langle +| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}. \tag{37}$$

Les termes hors-diagonaux non-nuls indiquent que l'état possède une **cohérence quantique** entre les états formant la base dans laquelle la matrice est exprimée. Néanmoins, on a bien un état pur au sens du point **c)** : $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}^2_{|+\rangle}\} = 1$.

e) Intrication de deux photons. On considère deux photons A et B préparés dans un état intriqué $|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|HH\rangle + |VV\rangle)$. L'opérateur densité dans cet état pur $\hat{\rho}_{AB} = |\Phi^+\rangle\langle\Phi^+|$ dans la base $\{|HH\rangle, |HV\rangle, |VH\rangle, |VV\rangle\}$ peut être explicité en utilisant la représentation suivante :

$$|HH\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}, \quad |HV\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}, \quad |VH\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}, \quad |VV\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}. \tag{38}$$

en notation de Dirac puis en représentation matricielle :

$$\hat{\rho}_{AB} = |\Phi^+\rangle\langle\Phi^+| = \frac{1}{2}(|HH\rangle + |VV\rangle)(\langle HH| + \langle VV|) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 1\\0 & 0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0 & 0\\1 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{39}$$

L'état du photon A seul est donné par

$$\hat{\rho}_A = \mathrm{Tr}_B\{\hat{\rho}_{AB}\} = {}_B\langle H|\hat{\rho}_{AB}|H\rangle_B + {}_B\langle V|\hat{\rho}_{AB}|V\rangle_B. \tag{40}$$

qu'on peut simplifier en utilisant la notation de Dirac :

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_A =& {}_B\langle H|\hat{\rho}_{AB}|H\rangle_B + {}_B\langle V|\hat{\rho}_{AB}|V\rangle_B \\
=& {}_B\langle H|\frac{1}{2}(|HH\rangle\langle HH| + |HH\rangle\langle VV| + |VV\rangle\langle HH| + |VV\rangle\langle VV|)|H\rangle_B \\
&+ {}_B\langle V|\frac{1}{2}(|HH\rangle\langle HH| + |HH\rangle\langle VV| + |VV\rangle\langle HH| + |VV\rangle\langle VV|)|V\rangle_B \\
=& \frac{1}{2}(|H\rangle_A\langle HH| + |H\rangle_A\langle VV|)|H\rangle_B + \frac{1}{2}(|V\rangle_A\langle HH| + |V\rangle_A\langle VV|)|V\rangle_B \\
=& \frac{1}{2}(|H\rangle_A\langle H|) + \frac{1}{2}(|V\rangle_A\langle V|) = \frac{1}{2}\mathbb{I}_A.
\end{aligned} \tag{41}$$

De la même façon, on trouve $\hat{\rho}_B = \frac{1}{2}\mathbb{I}_B$.

Ainsi,

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B =& \frac{1}{2}(|H\rangle_A\langle H|) + |V\rangle_A\langle V|) \otimes \frac{1}{2}(|H\rangle_B\langle H|) + |V\rangle_B\langle V|) \\
=& \frac{1}{4}(|HH\rangle\langle HH| + |HV\rangle\langle HV| + |VH\rangle\langle VH| + |VV\rangle\langle VV|) \\
=& \frac{1}{4}\mathbb{I}_{AB} \neq \hat{\rho}_{AB}
\end{aligned} \tag{42}$$

calculé en (42). Ceci est la conséquence directe de l'intrication. L'état conjoint contient des corrélations entre les deux photons, et ces corrélations ne sont pas contenues dans les descriptions individuelles des photons.